

Определение нелинейной задачи

Нелинейными называют такие дифференциально-краевые задачи, у которых параметры дифференциального уравнения или краевых условий зависят от решения.

В общем виде нелинейное дифференциальное уравнение эллиптического типа можно записать следующим образом:

$$-\operatorname{div}(\lambda(u)\operatorname{grad}u) + \gamma(u)u = f(u), \quad (2.1)$$

т.е. параметры λ , γ и f являются некоторыми функциями от u .

Возможна также ситуация, когда один из коэффициентов (чаще всего это коэффициент диффузии λ) зависит от производных решения, например, $\lambda = \lambda(\operatorname{grad}u)$.

Краевая задача может оказаться нелинейной не только в том случае, когда параметры дифференциального уравнения λ , γ и f зависят от решения u , но и тогда, когда параметры краевых условий θ , β или u_β зависят от u . Так краевое условие второго рода делает краевую задачу нелинейной, если параметр θ зависит (нелинейно) от u :

$$\lambda \frac{\partial u}{\partial n} = \theta(u). \quad (2.2)$$

Краевое условие же третьего рода является нелинейным, если его параметры β или u_β зависят от u . В общем случае нелинейное краевое условие третьего рода может быть записано в виде:

$$\lambda \frac{\partial u}{\partial n} + \beta(u)(u - u_\beta(u)) = 0 \quad (2.3)$$

(при этом, естественно, предполагается, что $u_\beta(u)$ – нелинейная функция u).

Обратим внимание, что параметры дифференциального уравнения λ , γ и f и параметры краевых условий θ , β или u_β могут зависеть не только от решения, но и от пространственных переменных, т.е. $\lambda = \lambda(u, x)$, $f = f(u, x)$ и т.д.

В результате конечноэлементной аппроксимации нелинейной краевой задачи (2.1), (2.2), (2.3) получается система нелинейных уравнений

$$\mathbf{A}(\mathbf{q})\mathbf{q} = \mathbf{b}(\mathbf{q}), \quad (2.4)$$

у которой компоненты матрицы $\mathbf{A}(\mathbf{q})$ и вектора правой части $\mathbf{b}(\mathbf{q})$ определяются следующим образом:

$$\begin{aligned} A_{ij}(\mathbf{q}) = & \int_{\Omega} \lambda(u^h(\mathbf{q})) \operatorname{grad} \psi_j \operatorname{grad} \psi_i d\Omega + \int_{\Omega} \gamma(u^h(\mathbf{q})) \psi_j \psi_i d\Omega + \\ & + \int_{S_3} \beta(u^h(\mathbf{q})) \psi_j \psi_i dS, \end{aligned} \quad (2.5)$$

$$b_i(\mathbf{q}) = \int_{\Omega} f(u^h(\mathbf{q})) \psi_i d\Omega + \int_{S_2} \theta(u^h(\mathbf{q})) \psi_i dS + \int_{S_3} \beta(u^h(\mathbf{q})) u_\beta(u^h(\mathbf{q})) \psi_i dS, \quad (2.6)$$

где

$$u^h(\mathbf{q}) = \sum_j q_j \psi_j. \quad (2.7)$$

Рассмотрим методы решения этой системы нелинейных уравнений. Подробно решение нелинейных задач описано в [2, с. 829].

Метод простой итерации

Наиболее простым для решения системы нелинейных конечноэлементных уравнений (2.4) является так называемый метод простой итерации. Он заключается в следующем.

Выбирается некоторое начальное приближение – функция u^0 (или вектор весов $\mathbf{q}^{(0)}$ разложения u^0 по базису $\{\psi_i\}$). Это начальное приближение обычно выбирается на основе некоторых априорных данных.

С помощью выбранного начального приближения $\mathbf{q}^{(0)}$ вычисляются коэффициенты конечноэлементной матрицы $A_{ij}(\mathbf{q}^{(0)})$ и вектора правой части $f_i(\mathbf{q}^{(0)})$ [см. соотношения (2.5)–(2.7)]. При этом параметры дифференциального уравнения и краевых условий, зависящие от решения u , могут быть представлены на каждом конечном элементе Ω_l в виде линейной комбинации базисных функций. Например, коэффициент диффузии λ и правая часть f могут быть представлены интерполянтами

$$\lambda = \sum_j \lambda_j \left(u^h(\mathbf{q}^{(0)}) \right) \psi_j, \quad f = \sum_j f_j \left(u^h(\mathbf{q}^{(0)}) \right) \psi_j,$$

где (в случае использования элементов лагранжева типа) $\lambda_j \left(u^h(\mathbf{q}^{(0)}) \right)$ – значение коэффициента $\lambda \left(u^h(\mathbf{q}^{(0)}) \right)$ в j -м узле, $f_j \left(u^h(\mathbf{q}^{(0)}) \right)$ – значение коэффициента $f \left(u^h(\mathbf{q}^{(0)}) \right)$ в j -м узле, ψ_j – базисная функция, соответствующая j -му узлу.

Итерационный процесс в методе простой итерации строится следующим образом. На первом шаге решается система линейных алгебраических уравнений $\mathbf{A}(\mathbf{q}^{(0)})\mathbf{q}^{(1)} = \mathbf{b}(\mathbf{q}^{(0)})$. В результате решения этой СЛАУ находится новое приближение $\mathbf{q}^{(1)}$ решения нелинейной системы (2.4), которое, в свою очередь, используется для нахождения компонент матрицы $A_{ij}(\mathbf{q}^{(1)})$ и вектора $b_i(\mathbf{q}^{(1)})$, затем решается система $\mathbf{A}(\mathbf{q}^{(1)})\mathbf{q}^{(2)} = \mathbf{b}(\mathbf{q}^{(1)})$ и т.д.

Останов итерационного процесса

Решение $\mathbf{q}^{(k)}$ на k -й итерации можно считать решением системы нелинейных конечноэлементных уравнений (2.4), если выполняется условие:

$$\frac{\left\| \mathbf{A}(\mathbf{q}^{(k)})\mathbf{q}^{(k)} - \mathbf{b}(\mathbf{q}^{(k)}) \right\|}{\left\| \mathbf{b} \right\|} < \varepsilon, \quad (2.8)$$

где ε – некоторое малое число, выбранное как требуемая точность решения нелинейной задачи. В данном случае норма абсолютной невязки нелинейной системы $\mathbf{A}(\mathbf{q}^{(k)})\mathbf{q}^{(k)} - \mathbf{b}(\mathbf{q}^{(k)})$ делится на норму её правой части для того, чтобы в качестве ε можно было использовать относительное, а не абсолютное значение порога невязки, что гораздо удобнее при решении большинства практических задач. При этом в качестве вектора \mathbf{b} можно брать как вектор $\mathbf{b}(\mathbf{q}^{(0)})$, вычисленный по начальному

приближению, так и вектор $\mathbf{b}(\mathbf{q}^{(k)})$, вычисленный по значению $\mathbf{q}^{(k)}$, полученному на текущей итерации по нелинейностям.

В ряде случаев в качестве критерия выхода можно использовать условие $\|\mathbf{q}^{(k)} - \mathbf{q}^{(k-1)}\| / \|\mathbf{q}^{(k)}\| < \delta$, где δ – некоторое малое число. Это условие означает, что при переходе к следующей итерации решение почти не меняется. Однако следует помнить, что такое условие выхода не гарантирует получение решения нелинейной задачи с требуемой точностью и может использоваться в «аварийных» случаях, когда итерационный процесс по нелинейностям начинает стагнировать. Можно также для остановки итерационного процесса по нелинейностям при его стагнации предусматривать выход по количеству итераций.

Использование релаксации

Для ускорения сходимости процесса решения нелинейной задачи, а во многих случаях и для её обеспечения может быть использован принцип релаксации. В этом случае каждое последующее приближение решения строится как

$$\mathbf{q}^{(k)} = \omega^k \bar{\mathbf{q}}^{(k)} + (1 - \omega^k) \mathbf{q}^{(k-1)}, \quad (2.9)$$

где ω^k – коэффициент релаксации, а $\bar{\mathbf{q}}^{(k)}$ – решение системы

$$\mathbf{A}(\mathbf{q}^{(k-1)}) \bar{\mathbf{q}}^{(k)} = \mathbf{b}(\mathbf{q}^{(k-1)}).$$

Метод простой итерации очень прост по программной реализации, но, как правило, требует выполнения большого количества итераций, а в ряде случаев вообще не даёт возможности получить решение нелинейной задачи, особенно в случаях с существенной зависимостью параметров задачи от решения (или его производных). Метод же Ньютона, хотя и значительно более сложный для программной реализации, обладает гораздо лучшей сходимостью при решении многих нелинейных задач.

Метод Ньютона

Метод Ньютона основан на линейаризации нелинейных уравнений системы (2.4) с использованием разложения в ряд Тейлора. Суть такой линейаризации заключается в следующем.

Каждый нелинейный член уравнений системы (2.4) представляется в виде разложения в ряд Тейлора в окрестности точки \mathbf{q}^0 (\mathbf{q}^0 – вектор весов, полученный на предыдущей итерации по нелинейностям или являющийся начальным приближением), причём этот ряд ограничивается членами с первыми производными. Так слагаемые левой части уравнений системы (2.4) представляются в виде

$$A_{ij}(\mathbf{q}) q_j \approx A_{ij}(\mathbf{q}^0) q_j^0 + \sum_r \frac{\partial (A_{ij}(\mathbf{q}) q_j)}{\partial q_r} \bigg|_{\mathbf{q}=\mathbf{q}^0} (q_r - q_r^0),$$

а компоненты вектора правой части – в виде

$$b_i(\mathbf{q}) \approx b_i(\mathbf{q}^0) + \sum_r \frac{\partial b_i(\mathbf{q})}{\partial q_r} \bigg|_{\mathbf{q}=\mathbf{q}^0} (q_r - q_r^0).$$

В результате из системы (2.4) получается система линейных алгебраических уравнений

$$\mathbf{A}^L \mathbf{q} = \mathbf{b}^L, \quad (2.10)$$

которую мы будем называть линейризованной по методу Ньютона конечноэлементной системой.

Сразу заметим, что при программной реализации линейризации уравнений системы (2.4) после сборки глобальной матрицы выполнять чрезвычайно сложно, поскольку процедуру сборки глобальной матрицы конечноэлементной системы уравнений легко запрограммировать тогда, когда компоненты локальных матриц и векторов являются числами, а не некоторыми функциями вектора решения \mathbf{q} . Поэтому линейризацию отдельных слагаемых уравнений системы (2.4) нужно проводить на уровне локальных матриц и векторов, и только после этого собирать из них глобальную матрицу \mathbf{A}^L и вектор правой части \mathbf{b}^L линейризованной конечноэлементной системы.

Рассмотрим конечный элемент Ω_m . Обозначим через $\hat{\mathbf{A}}$ локальную матрицу элемента Ω_m , через $\hat{\mathbf{b}}$ – его локальный вектор правой части, а через $\hat{\mathbf{q}}$ – подвектор глобального вектора \mathbf{q} , состоящий из весов (в локальной нумерации) базисных функций конечного элемента Ω_m .

Представим слагаемое $\hat{A}_{ij}(\hat{\mathbf{q}})\hat{q}_j$ в виде разложения в ряд Тейлора в окрестности значения $\hat{\mathbf{q}}^0$ и ограничимся членами с первой производной:

$$\begin{aligned} \hat{A}_{ij}(\hat{\mathbf{q}})\hat{q}_j &\approx \hat{A}_{ij}(\hat{\mathbf{q}}^0)\hat{q}_j^0 + \sum_{r=1}^{\hat{n}} \frac{\partial (\hat{A}_{ij}(\hat{\mathbf{q}})\hat{q}_j)}{\partial \hat{q}_r} \bigg|_{\hat{\mathbf{q}}=\hat{\mathbf{q}}^0} (\hat{q}_r - \hat{q}_r^0) = \\ &= \hat{A}_{ij}(\hat{\mathbf{q}}^0)\hat{q}_j^0 + \sum_{\substack{r=1 \\ r \neq j}}^{\hat{n}} \frac{\partial \hat{A}_{ij}(\hat{\mathbf{q}})}{\partial \hat{q}_r} \bigg|_{\hat{\mathbf{q}}=\hat{\mathbf{q}}^0} \hat{q}_j^0 (\hat{q}_r - \hat{q}_r^0) + \\ &+ \left\{ \hat{A}_{ij}(\hat{\mathbf{q}}^0) + \frac{\partial \hat{A}_{ij}(\hat{\mathbf{q}})}{\partial \hat{q}_j} \bigg|_{\hat{\mathbf{q}}=\hat{\mathbf{q}}^0} \hat{q}_j^0 \right\} (\hat{q}_j - \hat{q}_j^0) = \\ &= \hat{A}_{ij}(\hat{\mathbf{q}}^0)\hat{q}_j + \sum_{r=1}^{\hat{n}} \frac{\partial \hat{A}_{ij}(\hat{\mathbf{q}})}{\partial \hat{q}_r} \bigg|_{\hat{\mathbf{q}}=\hat{\mathbf{q}}^0} \hat{q}_j^0 (\hat{q}_r - \hat{q}_r^0), \end{aligned} \quad (2.11)$$

где \hat{n} – размер локальной матрицы (и, естественно, вектора) элемента Ω_m , а $\hat{\mathbf{q}}^0$ – значение $\hat{\mathbf{q}}$ на предыдущей итерации метода Ньютона.

Аналогично линейризуются и компоненты локального вектора правой части:

$$\hat{b}_i(\hat{\mathbf{q}}) \approx \hat{b}_i(\hat{\mathbf{q}}^0) + \sum_{r=1}^{\hat{n}} \frac{\partial \hat{b}_i(\hat{\mathbf{q}})}{\partial \hat{q}_r} \bigg|_{\hat{\mathbf{q}}=\hat{\mathbf{q}}^0} (\hat{q}_r - \hat{q}_r^0). \quad (2.12)$$

Из соотношения (2.11) видно, что в результате линейризации слагаемого $\hat{A}_{ij}(\hat{\mathbf{q}})\hat{q}_j$ появляются слагаемые, содержащие кроме \hat{q}_j ещё и другие компоненты вектора решения. Это значит, что в результате линейризации слагаемого $\hat{A}_{ij}(\hat{\mathbf{q}})\hat{q}_j$ мы получим вклады не только в компоненту \hat{A}_{ij}^L локальной матрицы $\hat{\mathbf{A}}^L$ линейризованной СЛАУ, но и в другие компоненты i -й строки $\hat{\mathbf{A}}^L$. В свою очередь, из соотношения (2.12) видно, что в результате линейризации компоненты $\hat{b}_i(\hat{\mathbf{q}})$ вектора правой части появляются слагаемые, содержащие компоненты вектора решения. Это означает, что в результате линейризации компонент вектора правой части системы

(2.4) появляются добавки в компоненты матрицы линеаризованной конечноэлементной системы. Таким образом, линеаризованная система (2.10) собирается из локальных матриц $\hat{\mathbf{A}}^L$ и локальных векторов $\hat{\mathbf{b}}^L$ следующего вида:

$$\hat{A}_{ij}^L = \hat{A}_{ij}(\hat{\mathbf{q}}^0) + \sum_{r=1}^{\hat{n}} \frac{\partial \hat{A}_{ir}(\hat{\mathbf{q}})}{\partial \hat{q}_j} \bigg|_{\hat{\mathbf{q}}=\hat{\mathbf{q}}^0} \hat{q}_r^0 - \frac{\partial \hat{b}_i(\hat{\mathbf{q}})}{\partial \hat{q}_j} \bigg|_{\hat{\mathbf{q}}=\hat{\mathbf{q}}^0} \hat{q}_r^0, \quad (2.13)$$

$$\hat{b}_i^L = \hat{b}_i(\hat{\mathbf{q}}^0) + \sum_{j=1}^{\hat{n}} \hat{q}_j^0 \sum_{r=1}^{\hat{n}} \frac{\partial \hat{A}_{ir}(\hat{\mathbf{q}})}{\partial \hat{q}_r} \bigg|_{\hat{\mathbf{q}}=\hat{\mathbf{q}}^0} \hat{q}_r^0 - \sum_{r=1}^{\hat{n}} \frac{\partial \hat{b}_i(\hat{\mathbf{q}})}{\partial \hat{q}_r} \bigg|_{\hat{\mathbf{q}}=\hat{\mathbf{q}}^0} \hat{q}_r^0. \quad (2.14)$$

Итерационный процесс в методе Ньютона строится аналогично тому, как был построен итерационный процесс в методе простой итерации. Очередной его шаг заключается в генерации по \mathbf{q}^0 (на первой итерации \mathbf{q}^0 формируется из начального приближения, на последующих в качестве \mathbf{q}^0 берётся $\mathbf{q}^{(k-1)}$) линеаризованной системы (2.10) и её решении, в результате чего (возможно, с использованием релаксации (2.9)) находится новое приближение $\mathbf{q}^{(k)}$. После этого проверяется критерий останова (2.8), и в случае его невыполнения осуществляется переход к следующей итерации метода Ньютона.

Обратим внимание, что при оценке невязки используются матрица и вектор нелинеаризованной системы. Это значит, что при вычислении невязки должны быть использованы не матрица \mathbf{A}^L и вектор \mathbf{b}^L , собираемые из локальных матриц и векторов вида (2.13) и (2.14), а матрица $\mathbf{A}(\mathbf{q})$ и вектор $\mathbf{b}(\mathbf{q})$, компоненты которых вычисляются, как и в методе простой итерации, по формулам (2.5)–(2.7), и в этих формулах в качестве вектора \mathbf{q} берётся вектор $\mathbf{q}^{(k)}$, полученный в результате решения линеаризованной системы (2.10).

Вычисление производных

Вычисление производных продемонстрируем на примере, когда коэффициент диффузии λ зависит от $\partial u / \partial x$. Рассмотрим конечный элемент Ω_m . Введём на нем локальную нумерацию узлов и базисных функций: $\hat{x}_1 = x_m$, $\hat{x}_2 = x_{m+1}$, $\hat{\psi}_1 = \psi_m$, $\hat{\psi}_2 = \psi_{m+1}$ (ψ_i – глобальные кусочно-линейные базисные функции).

Коэффициент $\lambda(\partial u / \partial x)$ на элементе Ω_m представим в виде линейного интерполянта

$$\begin{aligned} \lambda^{\Omega_m}(\partial u^h(\hat{\mathbf{q}}, x) / \partial x) &= \lambda^{\Omega_m} \left(\partial u^h(\hat{\mathbf{q}}, x) / \partial x \bigg|_{x=\hat{x}_1} \right) \hat{\psi}_1(x) + \\ &+ \lambda^{\Omega_m} \left(\partial u^h(\hat{\mathbf{q}}, x) / \partial x \bigg|_{x=\hat{x}_2} \right) \hat{\psi}_2(x), \end{aligned}$$

где $\partial u^h(\hat{\mathbf{q}}, x) / \partial x = \partial u^h(\hat{\mathbf{q}}, x) / \partial x \big|_{\Omega_m} = \sum_{i=1}^{\hat{n}} \hat{q}_i \partial \hat{\psi}_i(x) / \partial x$, и для случая кусочно-линейных базисных функций

$$\partial u^h(\hat{\mathbf{q}}, x) / \partial x = \hat{q}_1 \partial \hat{\psi}_1(x) / \partial x + \hat{q}_2 \partial \hat{\psi}_2(x) / \partial x.$$

Тогда компоненты локальной матрицы $\hat{\mathbf{A}}$ конечного элемента Ω_m могут быть вычислены следующим образом:

$$\begin{aligned} \hat{A}_{ij}(\hat{\mathbf{q}}) = & \int_{\Omega_m} \lambda^{\Omega_m} \left(\partial u^h(\hat{\mathbf{q}}, x) / \partial x \Big|_{x=\hat{x}_1} \right) \hat{\psi}_1 \text{grad } \hat{\psi}_j \text{grad } \hat{\psi}_i d\Omega + \\ & + \int_{\Omega_m} \lambda^{\Omega_m} \left(\partial u^h(\hat{\mathbf{q}}, x) / \partial x \Big|_{x=\hat{x}_2} \right) \hat{\psi}_2 \text{grad } \hat{\psi}_j \text{grad } \hat{\psi}_i d\Omega + \int_{\Omega_m} \gamma \hat{\psi}_j \hat{\psi}_i d\Omega. \end{aligned} \quad (2.15)$$

Вычислим производные по \hat{q}_j компонент локальной матрицы:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \hat{A}_{ir}(\hat{\mathbf{q}})}{\partial \hat{q}_j} \Big|_{\hat{\mathbf{q}}=\hat{\mathbf{q}}^0} = & \int_{\Omega_m} \frac{\partial \lambda^{\Omega_m} \left(\partial u^h(\hat{\mathbf{q}}, x) / \partial x \Big|_{x=\hat{x}_1} \right)}{\partial \hat{q}_j} \hat{\psi}_1 \text{grad } \hat{\psi}_i \text{grad } \hat{\psi}_r d\Omega + \\ & + \int_{\Omega_m} \frac{\partial \lambda^{\Omega_m} \left(\partial u^h(\hat{\mathbf{q}}, x) / \partial x \Big|_{x=\hat{x}_2} \right)}{\partial \hat{q}_j} \hat{\psi}_2 \text{grad } \hat{\psi}_i \text{grad } \hat{\psi}_r d\Omega. \end{aligned} \quad (2.16)$$

Таким образом, нам необходимо вычислить производные $\frac{\partial \lambda^{\Omega_m} \left(\partial u^h(\hat{\mathbf{q}}, x) / \partial x \Big|_{x=\hat{x}_l} \right)}{\partial \hat{q}_j} \Big|_{\hat{\mathbf{q}}=\hat{\mathbf{q}}^0}$,

которые уже не зависят от неизвестных \hat{q}_j и фактически являются константами на Ω_m , и вычислить интегралы $\int_{\Omega_m} \hat{\psi}_l \text{grad } \hat{\psi}_i \text{grad } \hat{\psi}_r d\Omega$.

Значения производных от коэффициента диффузии можно получить следующим образом:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \lambda^{\Omega_m} \left(\partial u^h(\hat{\mathbf{q}}, x) / \partial x \Big|_{x=\hat{x}_l} \right)}{\partial \hat{q}_j} \Big|_{\hat{\mathbf{q}}=\hat{\mathbf{q}}^0} = & \frac{\partial \lambda^{\Omega_m}}{\partial u^h(\hat{\mathbf{q}}, x) / \partial x \Big|_{x=\hat{x}_l}} \times \\ & \times \frac{\partial \left(\partial u^h(\hat{\mathbf{q}}, x) / \partial x \Big|_{x=\hat{x}_l} \right)}{\partial \hat{q}_j} \Big|_{\hat{\mathbf{q}}=\hat{\mathbf{q}}^0}, \end{aligned} \quad (2.17)$$

где значение производной от производной приближённого решения u^h по неизвестной \hat{q}_j вычисляется как

$$\begin{aligned} \frac{\partial \left(\partial u^h(\hat{\mathbf{q}}, x) / \partial x \Big|_{x=\hat{x}_l} \right)}{\partial \hat{q}_j} \Big|_{\hat{\mathbf{q}}=\hat{\mathbf{q}}^0} = & \frac{\partial \sum_r \hat{q}_r \left(\partial \hat{\psi}_r(x) / \partial x \right) \Big|_{x=\hat{x}_l}}{\partial \hat{q}_j} \Big|_{\hat{\mathbf{q}}=\hat{\mathbf{q}}^0} = \left(\partial \hat{\psi}_j(x) / \partial x \right) \Big|_{x=\hat{x}_l}. \end{aligned} \quad (2.18)$$

Способ же вычисления производной $\frac{\partial \lambda^{\Omega_m}}{\partial u^h(\hat{\mathbf{q}}, x)/\partial x} \Big|_{\partial u^h(\hat{\mathbf{q}}, x)/\partial x \Big|_{x=\hat{x}_l}$ зависит от того, каким образом

задана зависимость λ от $\partial u/\partial x$. Если эта зависимость задана таблично, то обычно строится аппроксимирующий её сплайн (чаще всего кубический сплайн с непрерывными первыми производными) и по нему вычисляется значение производной $\partial \lambda/(\partial u/\partial x)$. Этот случай является наиболее общим. В частных же случаях, когда зависимость λ от $\partial u/\partial x$ задаётся аналитически (формулой), производную $\partial \lambda/(\partial u/\partial x)$ можно вычислять аналитически. Например, если зависимость задана в виде $\lambda(u) = (\partial u/\partial x)^2 + 1$, то производная будет вычислена следующим образом:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \lambda^{\Omega_m}}{\partial u^h(\hat{\mathbf{q}}, x)/\partial x} \Big|_{\partial u^h(\hat{\mathbf{q}}, x)/\partial x \Big|_{x=\hat{x}_l}} &= 2 \left(\partial u^h(\hat{\mathbf{q}}, x)/\partial x \Big|_{x=\hat{x}_l} \right) = \\ &= 2 \sum_j \hat{q}_j^0 \left(\partial \hat{\psi}_j(x)/\partial x \right) \Big|_{x=\hat{x}_l}. \end{aligned}$$