

Methoden

Paul Kotyczka*

Erhaltung von Struktur und Flachheit bei der torbasierten Ortsdiskretisierung

...

DOI: ...

Empfangen ...; angenommen ...

Zusammenfassung: Mit einem kürzlich vorgestellten gemischten Galerkin-Ansatz lassen sich port-Hamiltonsche Systeme hyperbolischer Erhaltungsgleichungen in beliebiger Ortsdimension strukturerhaltend diskretisieren. Der Ansatz ist ebenso für parabolische Systeme in strukturierter Darstellung geeignet. Dieser Beitrag fasst die Methode zusammen. Weiterhin werden die Struktur und Approximationsgüte der resultierenden endlich-dimensionalen Zustandsraummodelle in Abhängigkeit der Entwurfsfreiheitsgrade analysiert. Hierzu werden exemplarisch die eindimensionale lineare Wellen- und Wärmeleitungsgleichung betrachtet und zunächst Eigenwertlagen und Lösungen von Anfangswertaufgaben analysiert. Im Hinblick auf den Steuerungsentwurf wird die Erhaltung eines flachen Ausgangs für die Wärmeleitungsgleichung nachgewiesen und die Güte der angenäherten Randsteuerungen untersucht.

Abstract: A recently proposed mixed Galerkin approach allows for the structure-preserving discretization of hyperbolic systems of conservation laws in port-Hamiltonian form in arbitrary spatial dimension. The approach is also suitable for parabolic systems in a structured representation. In this contribution, we summarize the method and analyze the structure and the approximation quality of the resulting finite-dimensional state space models depending on the design degrees of freedom. To this end, we consider the examples of the linear wave and heat equation and first analyze the eigenvalue locations and solutions of initial value problems. Concerning the design of feedforward control, we show conservation of a flat output for the heat equation and examine the quality of the approximate boundary controls.

*Corresponding Author: Paul Kotyczka: Technische Universität München, Lehrstuhl für Regelungstechnik, Boltzmannstraße 15, 85478 Garching, E-Mail: kotyczka@tum.de.

Schlagwörter: Port-Hamiltonsche Systeme, Erhaltungsgleichungen, Stokes-Dirac-Strukturen, strukturerhaltende Diskretisierung, Flachheit.

Keywords: Port-Hamiltonian systems, conservation laws, Stokes-Dirac structures, structure-preserving discretization, flatness.

PACS: ...

Übermittelt von: ...

Dedicated to ...

1 Einleitung

Die port-Hamiltonsche (PH) Darstellung dynamischer Systeme, siehe etwa die Bücher [1] und [2], ist besonders attraktiv für die Modellbildung vernetzter, heterogener und multi-physikalischer Systeme. *Leistungsflüsse* im System und über seine Grenzen, Energiespeicherung und -dissipation werden durch entsprechende Komponenten der mathematischen Modelle abgebildet. Die struktur- und passivitätserhaltende Verschaltung einzelner PH-Systeme, verbunden mit dem Nutzen *struktureller Invarianten* zum *Energy Shaping*, ist Grundlage an die Systemklasse angepasster Regelungsverfahren wie *Control by Interconnection*. Das Aufprägen einer PH-Struktur durch Zustandsrückführung ist Grundidee von *Interconnection and Damping Assignment Passivity-Based Control* (IDA-PBC). Die Aufsätze [3] und [4] geben einen Überblick über diese Regelungsmethoden für konzentriert-parametrische Systeme. [5], [6] und [7] sind ausgewählte Referenzen für die Regelung verteilt-parametrischer PH-Systeme mittels Randeingriff.

Für Systeme mit zwei Erhaltungsgleichungen (z. B. die Maxwell-Gleichungen der Elektrodynamik oder die Euler-Gleichungen der Fluidmechanik) basiert die PH-Systemdarstellung gemäß [8] auf der strikten Aufteilung von Leistungsstruktur, Dynamik- und Konstitutivgleichungen:

1. Die dualen Leistungsvariablen, die sog. *Flows* und *Efforts*¹ stehen zueinander in *linearen* Beziehungen. Diese Relationen definieren einen linearen Unterraum, auf dem eine *strukturelle* Leistungsbilanz gilt. Da bei Systemen von Erhaltungsgleichungen die Randgrößen über den Satz von Stokes hervortreten, wird dieser Unterraum als *Stokes-Dirac-Struktur* bezeichnet.
2. Aus den Flow-Variablen ergeben sich durch Zeitintegration *Zustandsgrößen* oder *Energievariablen*. Die entsprechenden *Dynamikgleichungen* können neben der Zeitableitung auch weitere Terme enthalten, wie z. B. den Rotationsterm bei den 2D-Flachwassergleichungen.
3. Die *Konstitutivgleichungen* schließen die Zustandsdarstellung ab. Sie stellen die Zusammenhänge zwischen Zuständen und Efforts her, wobei letztere auch als *Kozustände* oder *Koenergie*-Variablen bezeichnet werden. Die Konstitutivgleichungen enthalten Material- und Geometrieparameter und ggf. Nichtlinearitäten. Für die oben genannten hyperbolischen Systeme leiten sich die Kozustände aus einem *Energiefunktional* in den Zustandsgrößen ab.

Neben Systemen zweier Erhaltungsgleichungen, die auf partielle Differentialgleichungen (pDgl) vom *hyperbolischen* Typ führen, lässt sich die oben beschriebene strukturierte Darstellung auch auf diffusive Prozesse anwenden, die durch eine Erhaltungsgleichung beschrieben werden und auf pDgl vom *parabolischen* Typ führen. Im Unterschied zu den hyperbolischen Systemen wird aus einer der beiden Dynamik-Differentialgleichungen eine algebraische Konstitutivgleichung zwischen *Flow*- und *Effort*-Größe, siehe z. B. [9]. Angemerkt sei, dass gerade für die PH-Darstellung strukturmechanischer Probleme andere Zugänge als über die Stokes-Dirac-Struktur existieren [10].

Zur Ortsdiskretisierung von PH-Systemen von Erhaltungsgleichungen unter Erhaltung deren Struktur existieren bereits einige Ansätze. Gemäß [11] und [12] liefert die Diskretisierung der Stokes-Dirac-Struktur in *gemischten geometrischen Basen* eine endliche Anzahl von linearen Strukturgleichungen, wobei die resultierende konzen-

trierte Leistungsbilanz ausgeartete Bilinearformen enthält. Dieser Defekt wird durch die Definition *reduzierter* konzentrierter Effort-Variablen behoben, was jedoch zu stark besetzten Matrizen des linearen Zustandsraummodells und einem im Allgemeinen unerwünschten Durchgriff bei der Näherung hyperbolischer Systeme führt. Eine vertauschte Definition von Zustand und Kozustand in einer der beiden Erhaltungsgleichungen führt auf *metrikabhängige* Strukturgleichungen, erlaubt aber eine Finite-Elemente-Diskretisierung, deren Flow- und Effort-Freiheitsgrade unmittelbar ein nicht-ausgeartetes Dualitätsprodukt ergeben [13]. Konzentrierte Modelle von PH-Erhaltungsgleichungen lassen sich weiterhin durch deren Auswertung auf *dualen Komplexen* [14] bzw. mittels Finiten Volumen [15] oder Finiten Differenzen [16] auf versetzten Gittern erzeugen.

Die *differentielle Flachheit*, siehe z. B. [17], [18], [19] für endlich-dimensionale und [20], [21] für parabolische verteilt-parametrische Systeme, ist eine für den Steuerungsentwurf äußerst günstige Systemeigenschaft. Zustands- und Eingangstrajektorien (und damit Steuerungen) lassen sich durch einen flachen Ausgang und seine Zeitableitungen algebraisch berechnen. Die in diesem Aufsatz betrachtete flachheitsbasierte Steuerung der eindimensionalen Wärmeleitungsgleichung ist [22] entnommen. Für die Trajektorienplanung parabolischer Diffusions-Reaktions-Systeme auf höherdimensionalen Ortsgebieten ist auf [23] verwiesen, wo die Riesz-Spektraleigenschaft des Systemoperators die Reihendarstellung von Zustands- und Eingangstrajektorie erlaubt. [24] zeigt eine eindrucksvolle Umsetzung des Ansatzes für die Temperatursteuerung eines Tiefziehprozesses unter Verwendung von FEM-Modellen und Ordnungsreduktion.

Der vorliegende Artikel basiert auf dem in [25] beschriebenen Ansatz, der als Weiterentwicklung von [11] bzw. [12] verstanden werden kann und die schwache Form der *metrikunabhängigen* Stokes-Dirac-Struktur zugrunde legt. Nach gemischter Galerkin-Diskretisierung in geometrischen Basen ergibt (i) die Klassifizierung der Eingangs-Efforts und (ii) die parametrisierte Abbildung der Flow-Freiheitsgrade ein nicht-ausgeartetes diskretes Leistungsprodukt. Dieses erlaubt die Definition einer endlich-dimensionalen Dirac-Struktur zur Approximation der Stokes-Dirac-Struktur. Nach der konsistenten Näherung der Konstitutivgleichungen ergeben sich PH-Zustandsraummodelle, deren Matrizen schwach besetzt sind und die, wie im hyperbolischen Fall gewünscht, durchgriffsfrei sind. Die Abbildung der Flow-Freiheitsgrade erlaubt – bei Verwendung geometrischer Finiten Elemente und in beliebiger Ortsdimension – eine

¹ Während für die hyperbolischen Systeme bei entsprechender kanonischer Wahl der Systemgrößen die Dualitätsprodukte tatsächlich als Leistungen zu verstehen sind, kann es sich im parabolischen Fall um Entropieströme handeln. Im Sinne einer sprachlich kompakten Darstellung sollen *Flows* und *Efforts* als *Leistungsvariablen* zusammengefasst werden. Weiterhin wird auf eine Übersetzung dieser feststehenden Begriffe verzichtet.

Interpretation der konzentrierten Größen auf zueinander *topologisch dualen* Objekten mit verschiedener Orientierung. Diese Sichtweise ist gängig bei *geometrischen* Diskretisierungsverfahren wie z. B. in [26], [27], [28] beschrieben.

Bei geeigneter Parametrierung der Ortsdiskretisierung nach [25] lässt sich durch die Struktur der resultierenden Zustandsraummodelle die Erhaltung der Flachheitseigenschaft eines gegebenen Ausgangs nachweisen. Dies wird im vorliegenden Aufsatz anhand der eindimensionalen Wärmeleitungsgleichung demonstriert. Es sei daran erinnert, dass Passivität – eine Grundeigenschaft Port-Hamiltonscher Systeme – und Flachheit zwei sehr unterschiedliche Systemeigenschaften sind. Dies äußert sich im endlich-dimensionalen Fall z. B. durch die unterschiedliche Differenzordnung eines passiven bzw. flachen Ausgangs. Natürlich kann jedoch zur System-Differentialgleichung eines PH-Systems ein Ausgang mit der Flachheitseigenschaft definiert werden, deren Erhaltung unter numerischer Approximation von Interesse ist.

Der folgende Abschnitt stellt die betrachteten Systeme und die Notation mittels Differentialformen vor. Abschnitt 3 fasst die strukturerhaltende Diskretisierung hyperbolischer Systeme auf beliebigem Ortsgebiet zusammen. Abschnitt 4 zeigt exemplarisch die Diskretisierung der 1D-Wellengleichung mit Finiten Elementen nach Whitney [29]. In Abschnitt 5 werden auf derselben Grundlage numerische Modelle der Wärmeleitungsgleichung gezeigt, in denen der vorgegebene flache Ausgang erhalten bleibt. Mit Simulationen zur numerisch berechneten flachheitsbasierten Steuerung und Schlussbemerkungen endet der Aufsatz.

2 Systeme und Notation

Als Beispielsysteme werden die Wellen- und die Wärmeleitungsgleichung betrachtet. Im Folgenden wird die strukturierte PH-Darstellung der Wellengleichung mit den Differentialoperatoren der Vektorrechnung eingeführt und ihre Formulierung mittels *Differentialformen* daraus abgeleitet. Aus der Struktur der Gleichungen folgt unmittelbar die differentielle Energiebilanzgleichung. Die linearen Zusammenhänge der gemäß den Bilanzgleichungen (leistungs-)konjugierten Variablen definieren eine Stokes-Dirac-Struktur. In entsprechender Weise wird anschließend die Wärmeleitungsgleichung formuliert. Aus der Struktur lässt sich in diesem Fall zwar keine Erhaltungsgleichung (wie für die Energie bei der Wellengleichung)

ableiten, bei geeigneter Wahl von Variablen liefert die Struktur jedoch die Entropiebilanz.

2.1 Wellengleichung

Die Wellengleichung²

$$\partial_t^2 x(z, t) = c^2 \Delta x(z, t), \quad z \in \Omega \quad (1)$$

mit konstanter Ausbreitungsgeschwindigkeit c auf einem offenen, beschränkten Ortsgebiet $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ mit Lipschitzstetigem Rand $\partial\Omega$ lässt sich mittels der Definition von skalar- und vektorwertigen Zustandsvariablen

$$u(z, t) = -\partial_t x(z, t) \in \mathbb{R}, \quad \mathbf{v}(z, t) = \nabla x(z, t) \in \mathbb{R}^n \quad (2)$$

in folgender Weise darstellen:

$$\begin{bmatrix} f^u \\ \mathbf{f}^v \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & \text{div} \\ \text{grad} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e^u \\ \mathbf{e}^v \end{bmatrix}, \quad (\text{Struktur}) \quad (3a)$$

$$\begin{bmatrix} \partial_t u \\ \partial_t \mathbf{v} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -f^u \\ -\mathbf{f}^v \end{bmatrix}, \quad (\text{Dynamik}) \quad (3b)$$

$$\begin{bmatrix} e^u \\ \mathbf{e}^v \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \delta_u H \\ (\delta_v H)^T \end{bmatrix}. \quad (\text{Konstitutivgl.}) \quad (3c)$$

Die Konstitutivgleichungen sind durch das Hamilton- oder Energiefunktional

$$H(u, \mathbf{v}) = \int_{\Omega} \frac{1}{2} u^2 + \frac{1}{2} c^2 \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} \, dz \quad (4)$$

bestimmt³, dessen *Variationsableitungen* durch

$$\begin{aligned} & H(u + \delta u, \mathbf{v} + \delta \mathbf{v}) \\ &= H(u, \mathbf{v}) + \int_{\Omega} \delta_u H \, \delta u + \delta_v H \cdot \delta \mathbf{v} \, dz + o(\delta u, \delta \mathbf{v}) \end{aligned} \quad (5)$$

definiert sind. Die Gleichungen (3a), (3b) haben die Form von *Erhaltungsgleichungen* (z. B. Massen- und Impulsbilanz), deren Darstellung in physikalisch sehr einsichtiger Weise über *Differentialformen* erfolgen kann. Einige Grundtatsachen und Rechenregeln sowie die im Folgenden verwendete Notation sind im Anhang zusammengefasst. Unter Verwendung der Differentialformen

$$f^p := *f^u \in \Lambda^n(\Omega), \quad f^q := (\mathbf{f}^v)^{\flat} \in \Lambda^1(\Omega) \quad (6)$$

und

$$e^p := e^u \in \Lambda^0(\Omega), \quad e^q := (-1)^{n-1} *(\mathbf{e}^v)^{\flat} \in \Lambda^{n-1}(\Omega) \quad (7)$$

² Es gilt $\Delta = \text{div grad}$. Randbedingungen werden weiter unten festgelegt.

³ Der Punkt bezeichnet das Skalarprodukt zweier Vektoren.

lassen sich die Gleichungen (3a)-(3c) in der Form

$$\begin{bmatrix} f^p \\ f^q \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & (-1)^{n-1}d \\ d & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e^p \\ e^q \end{bmatrix}, \quad (\text{Struktur}) \quad (8a)$$

$$\begin{bmatrix} \partial_t p \\ \partial_t q \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -f^p \\ -f^q \end{bmatrix}, \quad (\text{Dynamik}) \quad (8b)$$

$$\begin{bmatrix} e^p \\ e^q \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \delta_p H \\ \delta_q H \end{bmatrix} \quad (\text{Konstitutivgl.}) \quad (8c)$$

darstellen. Der Faktor $(-1)^{n-1}$ sorgt dafür, dass sich beide Kozustände als Variationsableitungen des Energiefunktionals

$$\begin{aligned} H(p, q) &= \frac{1}{2}(p, p)_\Omega + \frac{1}{2}c^2(q, q)_\Omega \\ &= \frac{1}{2}\langle p | * p \rangle_\Omega + \frac{1}{2}c^2\langle q | * q \rangle_\Omega \end{aligned} \quad (9)$$

darstellen lassen, welches nun in den Differentialformen $p \in \Lambda^n(\Omega)$ und $q \in \Lambda^1(\Omega)$ definiert ist, wobei

$$\begin{aligned} H(p + \delta p, q + \delta q) \\ = H(p, q) + \langle \delta_p H | \delta p \rangle_\Omega + \langle \delta_q H | \delta q \rangle_\Omega + o(\delta p, \delta q) \end{aligned} \quad (10)$$

gilt. Aus der Strukturgleichung (8a) ergibt sich, unter Verwendung von (93), die Bilanzgleichung

$$\begin{aligned} \langle e^p | f^p \rangle_\Omega + \langle e^q | f^q \rangle_\Omega \\ + (-1)^n \langle \text{tr } e^q | \text{tr } e^p \rangle_\Gamma + (-1)^n \langle \text{tr } e^p | \text{tr } e^q \rangle_{\hat{\Gamma}} = 0, \end{aligned} \quad (11)$$

wobei $\Gamma \subset \partial\Omega$ und $\hat{\Gamma} \subset \partial\Omega$ nicht notwendigerweise zusammenhängende Gebiete sind, aus denen sich der Rand vollständig zusammensetzt. Durch Ersetzen der Dynamik- und Konstitutivgleichungen wird ersichtlich, dass die ersten beiden Terme die zeitliche Änderung $-\dot{H}$ des Energiefunktionals darstellen und die Randterme der auf Γ und $\hat{\Gamma}$ übertragenen Leistung entsprechen.

2.2 Stokes-Dirac-Struktur

Die Bilanzgleichung (11) ist unabhängig von Konstitutiv- und Dynamikgleichungen, sie ergibt sich *strukturell* aus (8a). Eine *Stokes-Dirac-Struktur*, siehe [8], bezeichnet einen linearen Unterraum der zueinander dualen Effort- und Flow-Formen, auf dem insbesondere eine solche Bilanzgleichung gilt. Sie stellt eine Erweiterung einer endlich-dimensionalen *Dirac-Struktur* auf die betrachtete verteilt-parametrische Systemklasse dar. Eine Dirac-Struktur kann als formale Beschreibung verallgemeinerter leistungserhaltender Verschaltungen verstanden werden.

Betrachtet wird zunächst ein endlich-dimensionaler Vektorraum F über \mathbb{R} (oder einem anderen Körper). Der

Dualraum $E = F^*$ enthält alle linearen Abbildungen von F auf \mathbb{R} , die als *Dualitätsprodukt* $\langle \cdot | \cdot \rangle : F \times E \rightarrow \mathbb{R}$ geschrieben werden können. Im endlich-dimensionalen Fall sind F und E isomorph und das Dualitätsprodukt kann mit einem inneren Produkt identifiziert werden. Für den Raum *dualer Leistungsvariablen* $F \times E \cong \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n$ ergibt $\langle \mathbf{e} | \mathbf{f} \rangle = \mathbf{e}^T \mathbf{f}$ eine Leistung, vgl. Bemerkung 6.6.1 in [30].

Definition 1 ([31], Definition 1.1.1). Eine *Dirac-Struktur* ist der lineare Unterraum $D \subset F \times E$, der *maximal isotrop* unter der symmetrischen Bilinearform

$$\langle\langle (\mathbf{f}_1, \mathbf{e}_1), (\mathbf{f}_2, \mathbf{e}_2) \rangle\rangle := \frac{1}{2} (\langle \mathbf{e}_1 | \mathbf{f}_2 \rangle + \langle \mathbf{e}_2 | \mathbf{f}_1 \rangle) \quad (12)$$

mit $(\mathbf{f}_1, \mathbf{e}_1), (\mathbf{f}_2, \mathbf{e}_2) \in F \times E$ ist⁴.

Isotrop bedeutet, dass $D \subset D^\perp$ gilt, mit D^\perp dem orthogonalen Komplement von D bzgl. $\langle\langle \cdot, \cdot \rangle\rangle$. Das heißt, für alle $(\mathbf{f}_1, \mathbf{e}_1), (\mathbf{f}_2, \mathbf{e}_2) \in D$ gilt $\langle\langle (\mathbf{f}_1, \mathbf{e}_1), (\mathbf{f}_2, \mathbf{e}_2) \rangle\rangle = 0$. Maximal isotrop bedeutet, dass zusätzlich kein $(\mathbf{f}_3, \mathbf{e}_3) \notin D$ existiert, so dass $\langle\langle (\mathbf{f}_1, \mathbf{e}_1), (\mathbf{f}_3, \mathbf{e}_3) \rangle\rangle = 0$. Das bedeutet, dass auch $D^\perp \subset D$ gilt, was schließlich $D = D^\perp$ impliziert. Aus der Isotropie folgt

$$\langle\langle (\mathbf{f}, \mathbf{e}), (\mathbf{f}, \mathbf{e}) \rangle\rangle = \langle \mathbf{e} | \mathbf{f} \rangle = 0 \quad \forall (\mathbf{f}, \mathbf{e}) \in F \times E. \quad (13)$$

Zur Formulierung einer Stokes-Dirac-Struktur sind Efforts und Flows auf dem Rand $\partial\Omega$ festzulegen.

Definition 2. Wir definieren die Restriktion der Effort-Differentialformen auf die Randgebiete Γ und $\hat{\Gamma}$ als Paare von *Randefforts* und *-flows* gemäß

$$\begin{aligned} e^\partial &= (-1)^n \text{tr } e^q |_\Gamma, & \hat{e}^\partial &= \text{tr } e^p |_{\hat{\Gamma}}, \\ f^\partial &= \text{tr } e^p |_\Gamma, & \hat{f}^\partial &= (-1)^n \text{tr } e^q |_{\hat{\Gamma}}. \end{aligned} \quad (14)$$

Die Randefforts e^∂ und \hat{e}^∂ werden im Weiteren als aufgeprägte Randbedingungen (*Eingänge*) verstanden, während es sich bei f^∂ und \hat{f}^∂ um die dazu leistungskonjugierten *Ausgangsgrößen* handelt. Die Randtore $(\text{tr } e^p, (-1)^n \text{tr } e^q)$ haben somit unterschiedliche *Kausalität* auf den Gebieten Γ und $\hat{\Gamma}$.

Satz 1. Der Unterraum von $\mathcal{F} \times \mathcal{E}$ mit

$$\begin{aligned} \mathcal{F} &= \Lambda^n(\Omega) \times \Lambda^1(\Omega) \times \Lambda^0(\Omega) \times \Lambda^{n-1}(\Omega), \\ \mathcal{E} &= \Lambda^0(\Omega) \times \Lambda^{n-1}(\Omega) \times \Lambda^{n-1}(\Omega) \times \Lambda^0(\Omega), \end{aligned} \quad (15)$$

⁴ Gilt zudem $\langle \mathbf{e}_1 | \mathbf{f}_2 \rangle = 0$ für alle $(\mathbf{f}_1, \mathbf{e}_1), (\mathbf{f}_2, \mathbf{e}_2) \in D$, dann spricht man von einer *separierbaren* Dirac-Struktur, die somit den Satz von Tellegen aus der elektrischen Netzwerktheorie verallgemeinert, siehe [2], Definition 2.2.

auf dem die Strukturgleichung (8a) zusammen mit der Definition von Randefforts und -flows (14) gilt, ist eine Stokes-Dirac-Struktur und es gilt

$$\langle e^p | f^p \rangle_\Omega + \langle e^q | f^q \rangle_\Omega + \langle e^\partial | f^\partial \rangle_\Gamma + \langle \hat{e}^\partial | \hat{f}^\partial \rangle_{\hat{\Gamma}} = 0. \quad (16)$$

Der Satz entspricht Theorem 2.1 in [8], beschränkt sich jedoch der Übersicht halber auf den Fall $p \in \Lambda^n(\Omega)$, $q \in \Lambda^1(\Omega)$, was z.B. die Maxwell-Gleichungen ausschließt. Der Beweis, dass (8a), (14) eine Dirac-Struktur beschreiben, erfolgt wie im endlich-dimensionalen Fall. Es wird gezeigt, dass der entsprechende Unterraum von Leistungsvariablen mit seinem orthogonalen Komplement bezüglich der symmetrisierten Fassung des durch (16) gegebenen Dualitätsprodukts zusammenfällt. Dabei wird der Satz von Stokes genutzt, was die Bezeichnung Stokes-Dirac-Struktur erklärt.

2.3 Wärmeleitungsgleichung

Die lineare Wärmeleitungsgleichung

$$\partial_t x(z, t) = k \Delta x(z, t), \quad k > 0, \quad z \in \Omega \quad (17)$$

beschreibt z.B. die Wärmeausbreitung in einem homogenen Medium. Für ein strukturiertes, *torbasiertes* Modell betrachten wir direkt die Erhaltungsgleichung für die innere Energiedichte $u \in \Lambda^n(\Omega)$,

$$\partial_t u = -dJ_Q \quad (18)$$

mit dem Wärmestrom $J_Q \in \Lambda^{n-1}(\Omega)$, der im isotropen Medium durch das Fouriersche Gesetz

$$J_Q = - * (\lambda(T) F) \quad (19)$$

mit der Wärmeleitfähigkeit $\lambda(T) \in \Lambda^0(\Omega)$ beschrieben wird. $F \in \Lambda^1(\Omega)$ stellt die thermodynamische treibende Kraft

$$F = dT \quad (20)$$

dar und entspricht dem Gradienten der Temperatur $T \in \Lambda^0(\Omega)$. Über die spezifische isochore Wärmekapazität $c_v(T) \in \Lambda^0(\Omega)$ lässt sich ein differenzieller Zusammenhang zwischen innerer Energie und Temperatur angeben:

$$\delta u = * c_v(T) \delta T. \quad (21)$$

Definiert man

$$f^p := \partial_t u \in \Lambda^n(\Omega), \quad f^q := F \in \Lambda^1(\Omega) \quad (22)$$

sowie

$$e^p := T \in \Lambda^0(\Omega), \quad e^q := J_Q \in \Lambda^{n-1}(\Omega), \quad (23)$$

so lassen sich die Gleichungen (18)-(21) unter der Annahme konstanter Materialparameter schreiben als

$$\begin{bmatrix} f^p \\ f^q \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & d \\ d & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e^p \\ e^q \end{bmatrix}, \quad (\text{Struktur}) \quad (24a)$$

$$\partial_t p = -f^p, \quad (\text{Dynamik}) \quad (24b)$$

$$\begin{bmatrix} e^p \\ e^q \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{c_v} * p \\ -\lambda * f^q \end{bmatrix}. \quad (\text{Konstitutivgl.}) \quad (24c)$$

Durch Anwendung der partiellen Integrationsformel auf $\langle e^p | f^p \rangle_\Omega = \langle e^p | d e^q \rangle_\Omega$ und die Festlegung von Randefforts und -flows

$$\begin{aligned} e^\partial &= -\text{tr } e^q|_\Gamma, & \hat{e}^\partial &= \text{tr } e^p|_{\hat{\Gamma}}, \\ f^\partial &= \text{tr } e^p|_\Gamma, & \hat{f}^\partial &= -\text{tr } e^q|_{\hat{\Gamma}} \end{aligned} \quad (25)$$

ergibt sich wiederum die strukturelle Bilanzgleichung (16). Im Fall der Wärmeleitung handelt es sich um keine Erhaltungsgleichung. Legt man statt der obigen Wahl $e^p = \delta_u S = \frac{1}{T}$, also die Variationsableitung der Entropie fest sowie $f^q = -F'$ mit F' der treibenden Kraft in Abhängigkeit von $\frac{1}{T}$, so ist (16) unmittelbar als *Entropiebilanzgleichung* zu verstehen und $\langle e^q | f^q \rangle_\Omega \geq 0$ steht für die nicht-negative Entropieerzeugungsrate, siehe [1], Abschnitt 4.2.2.

3 Strukturerhaltende Diskretisierung

In diesem Abschnitt wird das in [25] vorgestellte Vorgehen zur Diskretisierung der Stokes-Dirac-Struktur (8a), (14) zusammengefasst. Die resultierende *Dirac-Struktur* auf dem Raum der örtlich konzentrierten Leistungsvariablen ist die Grundlage für port-Hamiltonsche Zustandsraummodelle der Form

$$\dot{\mathbf{x}} = (\mathbf{J} - \mathbf{R}) \nabla H_d(\mathbf{x}) + \mathbf{G} \mathbf{u} \quad (26a)$$

$$\mathbf{y} = \mathbf{G}^T \nabla H_d(\mathbf{x}) + \mathbf{D} \mathbf{u} \quad (26b)$$

mit $\mathbf{J} = -\mathbf{J}^T$, $\mathbf{R} = \mathbf{R}^T \geq 0$ und ggf. $\mathbf{D} = -\mathbf{D}^T$. Im Falle der Wellengleichung impliziert die Strukturerhaltung Verlustlosigkeit des diskretisierten Modells, also $\mathbf{R} = \mathbf{0}$, während für die Wärmeleitungsgleichung $\mathbf{R} > 0$ und $\mathbf{J} = \mathbf{0}$ folgen. Damit (26) eine konsistente Näherung der verteilt-parametrischen (PH-)Systeme (8), (14) bzw. (24), (25) darstellt, ist, neben der Definition konzentrierter Dynamik, die *konsistente Diskretisierung* der Konstitutivgleichungen (8c) bzw. (24c) erforderlich. Diese führt für die Wellengleichung auf eine konzentrierte Energiefunktion $H_d(\mathbf{x})$, von der sich die konzentrierten Kozustände ableiten.

Bemerkung 1. Das Vorgehen wird hier für die Strukturgleichung (8a) im hyperbolischen Fall illustriert. Es ist, unter Berücksichtigung des Vorzeichens im Matrix-Differentialoperator, in gleicher Weise auf (24a) anwendbar, was auf die strukturerhaltenden Diskretisierungen der Wärmeleitungsgleichung in Abschnitt 5 führt.

3.1 Gemischter Galerkin-Ansatz

Betrachtet wird nun die *schwache Form* der Strukturgleichungen (8a) bzgl. des Dualitätsprodukts $\langle \cdot | \cdot \rangle_\Omega$ für alle geeigneten *Testformen* v^p und v^q :

$$\langle v^p | f^p \rangle_\Omega = (-1)^{n-1} \langle v^p | de^q \rangle_\Omega, \quad (27a)$$

$$\langle v^q | f^q \rangle_\Omega = \langle v^q | de^p \rangle_\Omega. \quad (27b)$$

Durch $f^p \in L^2\Lambda^n(\Omega)$, $f^q \in L^2\Lambda^1(\Omega)$, $e^p, v^p \in H^1\Lambda^0(\Omega)$ und $e^q, v^q \in H^1\Lambda^{n-1}(\Omega)$ werden die Funktionenräume der Flow-, Effort- und Testformen spezifiziert. Dabei bezeichnen $L^2\Lambda^k(\Omega)$ und $H^1\Lambda^k(\Omega)$ die Räume der k -Formen mit quadratisch Lebesgue-integrierbaren bzw. zusätzlich einfach schwach differenzierbaren Koeffizientenfunktionen. Durch partielle Integration gemäß (93) ergeben sich

$$\langle v^p | f^p \rangle_\Omega = (-1)^n \langle dv^p | e^q \rangle_\Omega - (-1)^n \langle v^p | e^q \rangle_{\partial\Omega}, \quad (28a)$$

$$\langle v^q | f^q \rangle_\Omega = (-1)^n \langle dv^q | e^p \rangle_\Omega - (-1)^n \langle v^q | e^p \rangle_{\partial\Omega}, \quad (28b)$$

wobei hier explizit die Randefforts auftreten, die, je nach Kausalität, als Eingangsgrößen aufgeprägt werden⁵.

Die Approximation der Differentialformen durch

$$f_h^p = \sum_{k=1}^{N_p} f_k^p \psi_k^p, \quad f_h^q = \sum_{l=1}^{N_q} f_l^q \psi_l^q, \quad (29)$$

$$e_h^p = \sum_{i=1}^{M_p} e_i^p \varphi_i^p, \quad e_h^q = \sum_{j=1}^{M_q} e_j^q \varphi_j^q \quad (30)$$

und

$$v_h^p = \sum_{i=1}^{M_p} v_i^p \varphi_i^p, \quad v_h^q = \sum_{j=1}^{M_q} v_j^q \varphi_j^q \quad (31)$$

liefert als diskretisierte Fassung der schwachen Form (28) die Gleichungen

$$(\mathbf{v}^p)^T \mathbf{M}_p \mathbf{f}^p + (\mathbf{v}^p)^T (\mathbf{K}_p + \mathbf{L}_p) \mathbf{e}^q = \mathbf{0}, \quad (32a)$$

$$(\mathbf{v}^q)^T \mathbf{M}_q \mathbf{f}^q + (\mathbf{v}^q)^T (\mathbf{K}_q + \mathbf{L}_q) \mathbf{e}^p = \mathbf{0}, \quad (32b)$$

die für alle $\mathbf{v}^p \in \mathbb{R}^{M_p}$, $\mathbf{v}^q \in \mathbb{R}^{M_q}$ gelten müssen. Bei *geometrischen* Verfahren werden solche endlich-dimensionalen Funktionenräume

$$\Psi^p = \text{span}\{\psi_1^p, \dots, \psi_{N_p}^p\} \subset L^2\Lambda^n(\Omega),$$

$$\Psi^q = \text{span}\{\psi_1^q, \dots, \psi_{N_q}^q\} \subset L^2\Lambda^1(\Omega) \quad (33)$$

und

$$\Phi^p = \text{span}\{\varphi_1^p, \dots, \varphi_{M_p}^p\} \subset H^1\Lambda^0(\Omega),$$

$$\Phi^q = \text{span}\{\varphi_1^q, \dots, \varphi_{M_q}^q\} \subset H^1\Lambda^{n-1}(\Omega) \quad (34)$$

verwendet, die eine *exakte* Nachbildung der äußeren Ableitung im diskretisierten Modell ergeben. Es müssen also – in verknappter Notation – $\Psi^p = d\Phi^q$ und $\Psi^q = d\Phi^p$ gelten, d. h. die so verketteten Funktionenräume bilden Subkomplexe des De-Rham-Komplexes. Diese Wahl führt auf Approximationsräume unterschiedlicher Dimension.

Lassen sich die Matrizen in (32) gemäß $-(\mathbf{K}_p + \mathbf{L}_p) = (-1)^{n-1} \mathbf{M}_p \mathbf{d}_p$, $-(\mathbf{K}_q + \mathbf{L}_q) = \mathbf{M}_q \mathbf{d}_q$ faktorisieren⁶, so erhält man aus der Gültigkeit für alle Testvektoren \mathbf{v}^p , \mathbf{v}^q mit

$$\begin{bmatrix} \mathbf{f}^p \\ \mathbf{f}^q \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{0} & (-1)^{n-1} \mathbf{d}_p \\ \mathbf{d}_q & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{e}^p \\ \mathbf{e}^q \end{bmatrix} \quad (35)$$

die diskretisierte Version der Strukturgleichungen (8a). Auswertung von (32) für $\mathbf{v}^p = \mathbf{e}^p$, $\mathbf{v}^q = \mathbf{e}^q$ und Addition beider Gleichungen ergibt, unter Verwendung der Eigenschaften der Matrizen $\mathbf{K}_p + \mathbf{L}_p$ und $\mathbf{K}_q + \mathbf{L}_q$, siehe [25], die Gleichung

$$(\mathbf{e}^p)^T \mathbf{M}_p \mathbf{f}^p + (\mathbf{e}^q)^T \mathbf{M}_q \mathbf{f}^q + (\mathbf{e}^q)^T \mathbf{L}_q \mathbf{e}^p + (\mathbf{e}^p)^T \hat{\mathbf{L}}_p \mathbf{e}^q = 0, \quad (36)$$

wobei die Bilinearformen über $\mathbf{L}_q = \mathbf{L}_p^T$ und $\hat{\mathbf{L}}_p = \hat{\mathbf{L}}_q^T$ den Randtermen in der kontinuierlichen Bilanzgleichung (11) entsprechen. Über die Zerlegungen $\mathbf{L}_q = \mathbf{T}_q^T \mathbf{S}_{p,0}$ und $\hat{\mathbf{L}}_p = \hat{\mathbf{T}}_p^T \hat{\mathbf{S}}_{q,0}$ lassen sich konzentrierte Randefforts (Eingänge) und Randflows (kollozierte Ausgänge) $\mathbf{e}^b, \mathbf{f}^b \in \mathbb{R}^{M_b}$ sowie $\hat{\mathbf{e}}^b, \hat{\mathbf{f}}^b \in \mathbb{R}^{M_b}$ gemäß

$$\mathbf{e}^b = \mathbf{T}_q \mathbf{e}^q, \quad \hat{\mathbf{e}}^b = \hat{\mathbf{T}}_p \mathbf{e}^p, \quad (37a)$$

$$\mathbf{f}_0^b = \mathbf{S}_{p,0} \mathbf{e}^p, \quad \hat{\mathbf{f}}_0^b = \hat{\mathbf{S}}_{q,0} \mathbf{e}^q \quad (37b)$$

definieren, mit denen sich

$$(\mathbf{e}^p)^T \mathbf{M}_p \mathbf{f}^p + (\mathbf{e}^q)^T \mathbf{M}_q \mathbf{f}^q + (\mathbf{e}^b)^T \mathbf{f}^b + (\hat{\mathbf{e}}^b)^T \hat{\mathbf{f}}^b = 0 \quad (38)$$

als diskretisierte Entsprechung von (16) ergibt.

Ziel ist nun, dieser konzentrierten Leistungsbilanz eine endlich-dimensionale Dirac-Struktur zuzuordnen, die

⁵ Die Aufteilung des Randes $\partial\Omega$ in Γ und $\hat{\Gamma}$ wird weiter unten berücksichtigt.

⁶ Wie z. B. bei den in den Beispielen verwendeten Whitney-Formen.

die unendlich-dimensionale Stokes-Dirac-Struktur approximiert. Problematisch bei der vorliegenden Bilanzgleichung (38) sind jedoch die beiden ersten Terme, die aufgrund des gemischten Ansatzes, der auf i. d. R. nichtquadratische Matrizen $\mathbf{M}_p, \mathbf{M}_q$ mit Rangabfall führt, *ausgeartete* Bilinearformen darstellen. Zwar ist der durch die Gleichungen (35), (37) beschriebene Unterraum konzentrierter Flow- und Effort-Freiheitsgrade *isotrop* bzgl. der durch Symmetrisierung von (38) definierten Paarung, jedoch nicht *maximal isotrop*. Das bedeutet unter anderem, dass die Bilanzgleichung (38) auch von Vektoren $\mathbf{f}^p, \mathbf{f}^q, \mathbf{e}^p$ und \mathbf{e}^q erfüllt wird, die nicht über die konzentrierte Strukturgleichung (35) zusammenhängen.

3.2 Dirac-Struktur

Ein Lösungsansatz, der auf eine endlich-dimensionale Dirac-Struktur mit einer nicht-ausgearteten Bilanzgleichung der Gestalt

$$(\tilde{\mathbf{e}}^p)^T \tilde{\mathbf{f}}^p + (\tilde{\mathbf{e}}^q)^T \tilde{\mathbf{f}}^q + (\mathbf{e}^b)^T \mathbf{f}^b + (\hat{\mathbf{e}}^b)^T \hat{\mathbf{f}}^b = 0 \quad (39)$$

mit $\tilde{\mathbf{e}}^p, \tilde{\mathbf{f}}^p \in \mathbb{R}^{\tilde{N}_p}$, $\tilde{\mathbf{e}}^q, \tilde{\mathbf{f}}^q \in \mathbb{R}^{\tilde{N}_q}$ führt, ist die geeignete lineare Abbildung der Flow- und Effort-Freiheitsgrade

$$\tilde{\mathbf{f}}^p = \mathbf{P}_{fp} \mathbf{f}^p, \quad \tilde{\mathbf{f}}^q = \mathbf{P}_{fq} \mathbf{f}^q, \quad (40a)$$

$$\tilde{\mathbf{e}}^p = \mathbf{P}_{ep} \mathbf{e}^p, \quad \tilde{\mathbf{e}}^q = \mathbf{P}_{eq} \mathbf{e}^q, \quad (40b)$$

die i. A. mit einer Modifizierung der konzentrierten Ausgangsgrößen

$$\mathbf{f}^b = \mathbf{S}_p \mathbf{e}^p, \quad \hat{\mathbf{f}}^b = \hat{\mathbf{S}}_q \mathbf{e}^q \quad (41)$$

verbunden ist. Die Gleichungen (35), (40), (37a) und (41) lassen sich zusammenfassen zu

$$\underbrace{\begin{bmatrix} \tilde{\mathbf{f}}^p \\ \hat{\mathbf{f}}^b \\ \tilde{\mathbf{f}}^q \\ \mathbf{f}^b \end{bmatrix}}_{\tilde{\mathbf{f}}} = \underbrace{\begin{bmatrix} \mathbf{0} & (-1)^{n-1} \mathbf{P}_{fp} \mathbf{d}_p \\ \mathbf{0} & \hat{\mathbf{S}}_q \\ \mathbf{P}_{fq} \mathbf{d}_q & \mathbf{0} \\ \mathbf{S}_p & \mathbf{0} \end{bmatrix}}_{\mathbf{E}^T} \underbrace{\begin{bmatrix} \mathbf{e}^p \\ \mathbf{e}^q \end{bmatrix}}_{\mathbf{e}}, \quad (42a)$$

$$\underbrace{\begin{bmatrix} \tilde{\mathbf{e}}^p \\ \hat{\mathbf{e}}^b \\ \tilde{\mathbf{e}}^q \\ \mathbf{e}^b \end{bmatrix}}_{\tilde{\mathbf{e}}} = \underbrace{\begin{bmatrix} \mathbf{P}_{ep} & \mathbf{0} \\ \hat{\mathbf{T}}_p & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{P}_{eq} \\ \mathbf{0} & \mathbf{T}_q \end{bmatrix}}_{\mathbf{F}^T} \underbrace{\begin{bmatrix} \mathbf{e}^p \\ \mathbf{e}^q \end{bmatrix}}_{\mathbf{e}}. \quad (42b)$$

Satz 2. Gegeben seien die konzentrierten Strukturgleichungen (35) und die Randefforts (Eingangsgroößen) (37a). Für die Matrizen in (40) und (41) gelte

$$(-1)^{n-1} \mathbf{d}_p^T \mathbf{P}_{fp}^T \mathbf{P}_{ep} + \mathbf{P}_{eq}^T \mathbf{P}_{fq} \mathbf{d}_q + \mathbf{T}_q^T \mathbf{S}_p + \hat{\mathbf{S}}_q^T \hat{\mathbf{T}}_p = \mathbf{0}. \quad (43)$$

Zudem seien die Matrizen

$$\begin{bmatrix} \mathbf{P}_{ep} \\ \hat{\mathbf{T}}_p \end{bmatrix} \quad \text{und} \quad \begin{bmatrix} \mathbf{P}_{eq} \\ \mathbf{T}_q \end{bmatrix} \quad (44)$$

quadratisch und haben vollen Rang M_p bzw. M_q . Dann ist der Unterraum

$$\bar{D} = \{(\bar{\mathbf{f}}, \bar{\mathbf{e}}) \in \bar{\mathcal{F}} \times \bar{\mathcal{E}} \mid \bar{\mathbf{f}} = \mathbf{E}^T \mathbf{e}, \bar{\mathbf{e}} = \mathbf{F}^T \mathbf{e}, \mathbf{e} \in \mathbb{R}^{M_p + M_q}\} \quad (45)$$

mit $\bar{\mathcal{F}} = \mathbb{R}^{\tilde{N}_p + \tilde{N}_q + M_b + \hat{M}_b}$ und $\bar{\mathcal{E}} = \mathbb{R}^{\tilde{N}_p + \tilde{N}_q + M_b + \hat{M}_b}$ eine Dirac-Struktur. Die Ein-/Ausgangs-Darstellung von \bar{D} lautet

$$\begin{bmatrix} -\tilde{\mathbf{f}}^p \\ -\tilde{\mathbf{f}}^q \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{J}_p \\ \mathbf{J}_q & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \tilde{\mathbf{e}}^p \\ \tilde{\mathbf{e}}^q \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{B}_p \\ \mathbf{B}_q & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{e}}^b \\ \mathbf{e}^b \end{bmatrix}, \quad (46a)$$

$$\begin{bmatrix} \hat{\mathbf{f}}^b \\ \mathbf{f}^b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{B}_q^T \\ \mathbf{B}_p^T & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \tilde{\mathbf{e}}^p \\ \tilde{\mathbf{e}}^q \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{D}_q \\ \mathbf{D}_p & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{e}}^b \\ \mathbf{e}^b \end{bmatrix} \quad (46b)$$

mit $\mathbf{J}_p = -\mathbf{J}_p^T$, $\mathbf{D}_q = -\mathbf{D}_q^T$, wobei

$$\begin{bmatrix} -\mathbf{J}_p & -\mathbf{B}_p \\ \mathbf{B}_q^T & \mathbf{D}_q \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (-1)^{n-1} \mathbf{P}_{fp} \mathbf{d}_p & \\ & \hat{\mathbf{S}}_q \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{P}_{eq} \\ \mathbf{T}_q \end{bmatrix}^{-1},$$

$$\begin{bmatrix} -\mathbf{J}_q & -\mathbf{B}_q \\ \mathbf{B}_p^T & \mathbf{D}_p \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{P}_{fq} \mathbf{d}_q & \\ & \mathbf{S}_p \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{P}_{ep} \\ \hat{\mathbf{T}}_p \end{bmatrix}^{-1}. \quad (47)$$

Der Beweis beruht darauf, dass (42) genau dann die Bild-Darstellung einer Dirac-Struktur ist, wenn unter den gegebenen Rangbedingungen die Matrixgleichung (43) gilt. Die Ein-/Ausgangs-Darstellung ergibt sich dann aus der Invertierbarkeit der quadratischen Matrizen in (44). Für Details siehe [25].

3.3 Konstitutivgleichungen

Um aus (46) auf das endlich-dimensionale Zustandsraummodell (26) zu kommen, fehlt die konsistente Näherung der Konstitutivgleichungen (8c). Diese lässt sich, wie z. B. bei Finiten-Volumen-Verfahren, auf Grundlage eines Stationärzustandes herleiten. In [25] ist diese konsistente Approximation für den Fall einer 2D-Wellengleichung bei Verwendung einfachster Whitney-Formen skizziert. Für den in diesem Beitrag betrachteten linearen, eindimensionalen Fall werden im nächsten Abschnitt die Beziehungen

$$\tilde{\mathbf{e}}^p = \mathbf{Q}_p \tilde{\mathbf{p}}, \quad \tilde{\mathbf{e}}^q = \mathbf{Q}_q \tilde{\mathbf{q}} \quad (48)$$

mit den positiv definiten *Hodge-Diagonalmatrizen*^T \mathbf{Q}_p und \mathbf{Q}_q hergeleitet. Damit lassen sich die konzentrierten Kozustände von der quadratischen Energiefunktion

$$H_d(\tilde{\mathbf{p}}, \tilde{\mathbf{q}}) = \frac{1}{2} \tilde{\mathbf{p}}^T \mathbf{Q}_p \tilde{\mathbf{p}} + \frac{1}{2} \tilde{\mathbf{q}}^T \mathbf{Q}_q \tilde{\mathbf{q}}. \quad (49)$$

⁷ Siehe z. B. [32] zu deren Konstruktion.

ableiten, wobei analog zu (40a)

$$\tilde{\mathbf{p}} = \mathbf{P}_{fp}\mathbf{p}, \quad \tilde{\mathbf{q}} = \mathbf{P}_{fq}\mathbf{q} \quad (50)$$

gilt. Darin sind $\mathbf{p} \in \mathbb{R}^{N_p}$, $\mathbf{q} \in \mathbb{R}^{N_q}$ die Koeffizientenvektoren der Näherungen

$$p^h = \sum_{k=1}^N p_k \psi_k^p, \quad q^h = \sum_{l=1}^N q_l \psi_l^q. \quad (51)$$

4 Eindimensionale Näherungsmodelle

Das beschriebene Vorgehen wird nun auf ein hyperbolisches System zweier Erhaltungsgrößen auf dem eindimensionalen Ortsgebiet $\Omega = (0, 1)$ angewandt. Randefforts und -flows werden als

$$\begin{aligned} e^\partial &= -\operatorname{tr} e^q|_{z=0}, & \hat{e}^\partial &= \operatorname{tr} e^p|_{z=1}, \\ f^\partial &= \operatorname{tr} e^p|_{z=0}, & \hat{f}^\partial &= \operatorname{tr} e^q|_{z=1} \end{aligned} \quad (52)$$

festgelegt, wobei e^∂ und \hat{e}^∂ als Randbedingungen aufgeprägt werden. Das Ortsgebiet wird gleichmäßig in N Intervalle $I_k = ((k-1)h, kh)$ unterteilt, die zwischen $N+1$ Knoten $z_i = (i-k)h$ liegen, wobei $h = \frac{1}{N}$ die Schrittweite bezeichnet. Die Approximationsräume $\Psi^p = \Psi^q$ und $\Phi^p = \Phi^q$ werden aufgespannt von den Whitney-Formen [29] vom Grade 1 und 0

$$\psi_k^p = \psi_k^q = \begin{cases} \frac{1}{h} dz, & z \in I_k, \\ 0, & \text{sonst,} \end{cases} \quad (53a)$$

$$\varphi_i^p = \varphi_i^q = \begin{cases} \frac{1}{h}(z - z_{i-1}), & z \in I_{i-1}, \quad i > 1, \\ 1 - \frac{1}{h}(z - z_i), & z \in I_i, \quad i < N+1, \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases} \quad (53b)$$

Insbesondere gilt für die genäherte Erhaltungsgröße p^h

$$\langle * \psi_k^p | p^h \rangle_\Omega = \langle * \psi_k^p | \psi_k^p \rangle_\Omega p_k = \frac{1}{h} p_k \quad (54)$$

und analog für q^h .

4.1 Entwurfsmatrizen der Dirac-Struktur

Die gemischte Galerkin-Approximation liefert die konzentrierten Strukturgleichungen (35) mit $n = 1$ und den numerischen Ableitungsmatrizen

$$\mathbf{d}_p = \mathbf{d}_q = \begin{bmatrix} -1 & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & & -1 & 1 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{N \times (N+1)}, \quad (55)$$

die den Ko-Inzidenzmatrizen des durch das Gitter definierten gerichteten Graphen entsprechen. Die Freiheitsgrade in $\mathbf{f}^p, \mathbf{f}^q \in \mathbb{R}^N$ lassen sich als Näherungen der Integrale von $f^p, f^q \in L^2 \Lambda^1(\Omega)$ auf den Intervallen I_k verstehen, während $\mathbf{e}^p, \mathbf{e}^q \in \mathbb{R}^{N+1}$ die Knotenwerte von $e^p, e^q \in H^1 \Lambda^0(\Omega)$ approximieren. Die aufgeprägten Randbedingungen gemäß (52) werden durch (37a) mit

$$\mathbf{T}_q = [-1 \quad 0 \quad \dots \quad 0], \quad \hat{\mathbf{T}}_p = [0 \quad \dots \quad 0 \quad 1] \quad (56)$$

abgebildet. Durch

$$\mathbf{P}_{eq} = [\mathbf{0}_{N \times 1} \quad \mathbf{I}_N], \quad \mathbf{P}_{ep} = [\mathbf{I}_N \quad \mathbf{0}_{N \times 1}] \quad (57)$$

werden jene Effort-Freiheitsgrade definiert, die die Rolle der Kozustände $\tilde{e}_i^p, \tilde{e}_j^q, i, j = 1, \dots, N$ übernehmen. Dadurch werden die Matrizen in (44), bis auf einen Vorzeichenwechsel, zu Einheitsmatrizen. Auf Grundlage dieser Festlegungen ergeben sich für die Definitionen konzentrierter Flows (40a) und kollokierter Ausgänge (41) die Matrizen

$$\mathbf{P}_{fp} = \mathbf{P}_{fq}^T = \begin{bmatrix} 1-\alpha & & & & \\ \alpha & 1-\alpha & & & \\ & \ddots & \ddots & & \\ & & & \alpha & 1-\alpha \end{bmatrix} \quad (58)$$

sowie

$$\begin{aligned} \mathbf{S}_p &= [1-\alpha \quad \alpha \quad 0 \quad \dots \quad 0], \\ \hat{\mathbf{S}}_q &= [0 \quad \dots \quad 0 \quad \alpha \quad 1-\alpha], \end{aligned} \quad (59)$$

welche, gemeinsam mit den Ableitungs- und Eingangsrandmatrizen, die Matrixbedingung (43) mit $n = 1$ erfüllen. Der Parameter $\alpha \in \mathbb{R}$ ist ein Freiheitsgrad des Diskretisierungsverfahrens. Seine Wirkung auf die resultierenden Näherungsmodelle der Wellen- und Wärmeleitungsgleichung wird in den folgenden Abschnitten 4.3 und 5 diskutiert.

Bemerkung 2. Mit den gegebenen Matrizen ist leicht nachzuprüfen, dass, im Gegensatz zum Ansatz nach [11], kein Durchgriff in der Ein-/Ausgangs-Darstellung (46) entsteht.

4.2 Konstitutivgleichungen

Wir bestimmen die Elemente der diagonalen Hodge-Matrizen für eine konsistente Näherung der Konstitutivgleichungen

$$e^p = *p, \quad e^q = c^2 *q \quad (60)$$

gemäß (8c), (9) auf Grundlage eines durch

$$p = \bar{p} dz, \quad q = \bar{q} dz \quad (61)$$

gegebenen Stationärzustands mit Konstanten $\bar{p}, \bar{q} \in \mathbb{R}$. Wir betrachten hierzu zunächst die Variation des Energiefunktional (9) auf Grundlage der Approximation der Erhaltungsgrößen (51). Die Variationen $\delta(\psi_k^p p_k)$ und $\delta(\psi_l^q q_l)$ in den konzentrierten Freiheitsgraden p_k und q_l liefern, unter Vernachlässigung der Terme höherer Ordnung,

$$\delta H \approx \sum_{k=1}^N \underbrace{\langle * \psi_k^p | \psi_k^p \rangle_{\Omega} p_k}_{=: \delta_{p_k} H} \delta p_k + \sum_{l=1}^N \underbrace{c^2 \langle * \psi_l^q | \psi_l^q \rangle_{\Omega} q_l}_{=: \delta_{q_l} H} \delta q_l. \quad (62)$$

Mit p_k und q_l als konzentrierten Zustandsgrößen wären die Ausdrücke $\delta_{p_k} H$ und $\delta_{q_l} H$ konsistente Näherungen von (60), die bei Einsetzen von $p_k = \bar{p}_k = h\bar{p}$ bzw. $q_l = \bar{q}_l = h\bar{q}$ die konsistenten Werte \bar{p} bzw. \bar{q} der Kozustände in den Knoten ergäben. Die konzentrierte Energiefunktion (49) ist jedoch in den Zustandsvektoren $\tilde{\mathbf{p}}$ und $\tilde{\mathbf{q}}$ gemäß (50) ausgedrückt. Im Stationärzustand (61) lassen sich die Relationen (50) umkehren zu

$$\bar{p}_k = \frac{1}{\sum_{k=1}^N [\mathbf{P}_{fp}]_{i,k}} \tilde{p}_i, \quad \bar{q}_l = \frac{1}{\sum_{l=1}^N [\mathbf{P}_{fq}]_{j,l}} \tilde{q}_j, \quad (63)$$

woraus sich mit (54) schließlich die konsistent ermittelten Diagonalelemente

$$[\mathbf{Q}_p]_{i,i} = \frac{1}{h \sum_{k=1}^N [\mathbf{P}_{fp}]_{i,k}}, \quad [\mathbf{Q}_q]_{j,j} = \frac{c^2}{h \sum_{l=1}^N [\mathbf{P}_{fq}]_{j,l}} \quad (64)$$

der Hodge-Matrizen laut (48) ergeben. Mit den Matrizen $\mathbf{P}_{fp} = \mathbf{P}_{fq}^T$ gemäß (58) erhält man schließlich

$$\mathbf{Q}_p = \frac{1}{h} \text{diag}\left\{\frac{1}{1-\alpha}, 1, \dots, 1\right\}, \quad (65a)$$

$$\mathbf{Q}_q = \frac{c^2}{h} \text{diag}\left\{1, \dots, 1, \frac{1}{1-\alpha}\right\}. \quad (65b)$$

4.3 Numerische Modelle der Wellengleichung

Ergänzt man die Ein-/Ausgangs-Darstellung der Dirac-Struktur (46) mit den konzentrierten Konstitutivgleichungen (48) um die Dynamik

$$\dot{\tilde{\mathbf{p}}} = -\tilde{\mathbf{f}}^p, \quad \dot{\tilde{\mathbf{q}}} = -\tilde{\mathbf{f}}^q, \quad (66)$$

so ergeben sich *konservative* Zustandsraummodelle der Form (26) mit $\mathbf{R} = \mathbf{0}$, also ohne numerische Dissipation. Diese Eigenschaft ist unabhängig vom Parameter α , über den sich jedoch die Approximationsgüte der numerischen Modelle beeinflussen lässt.

4.3.1 Interpretation von α

Die Verwendung von Whitney-Approximationsformen erlaubt eine klare Interpretation des Parameters α . Hierzu betrachten wir die konzentrierten Konstitutivgleichungen (48) sowie die Definition der konzentrierten Zustände (50) mittels der Matrizen (58). Während die Elemente der Vektoren $\tilde{\mathbf{e}}^p$, $\tilde{\mathbf{e}}^q$ genäherte Kozustandsgrößen an den Gitterknoten darstellen, an denen nicht die Randbedingungen aufgeprägt werden, entsprechen die Elemente von \mathbf{p} , \mathbf{q} den integrierten Erhaltungsgrößen auf den dazwischen liegenden Intervallen. Die Elemente der Zustandsvektoren $\tilde{\mathbf{p}}$, $\tilde{\mathbf{q}}$ stellen mit α und $1 - \alpha$ gewichtete Summen dieser diskreten Erhaltungsgrößen dar. Hieraus ergeben sich folgende Interpretationen der konzentrierten Konstitutivgleichungen in Abhängigkeit von α .

$\alpha = 0$. Der an einem Knoten verortete Kozustand \tilde{e}_i^p (\tilde{e}_j^q) berechnet sich aus dem konzentrierten Zustand $\tilde{p}_i = p_i$ ($\tilde{q}_j = q_j$) auf dem benachbarten Intervall. Das Intervall liegt in der Richtung, aus der die entsprechende Randgröße \hat{e}^b (e^b) als Eingang aufgeprägt wird. Es handelt sich um eine *einseitige* numerische Näherung der Konstitutivgleichungen, die die Richtung bevorzugt, aus der die Eingangsinformation kommt. Insofern können Werte $\alpha < \frac{1}{2}$ als *Upwind*-Parametrierungen verstanden werden.

$\alpha < 0$. In diesem Fall enthalten die leicht umgestellten Konstitutivgleichungen

$$\tilde{e}_i^p = p_i + (-\alpha)(p_i - p_{i-1}), \quad \tilde{e}_j^q = q_j + (-\alpha)(q_j - q_{j+1}) \quad (67)$$

positiv gewichtete Differenzterme, die sich, wie weiter unten illustriert, als günstig für die numerische Lösung der hyperbolischen Wellengleichung herausstellen.

$\alpha = \frac{1}{2}$. In diesem Fall werden die genäherten konzentrierten Erhaltungsgrößen zu beiden Seiten eines Knotens für die Ermittlung des Kozustands herangezogen. Eine solche *zentrierte* Näherung ist besonders geeignet für die numerische Lösung der parabolischen Wärmeleitungsgleichung, die *symmetrische* Diffusionsvorgänge beschreibt.

Abbildung 1 illustriert die Wirkung des Entwurfsparameters α in Bezug auf die Definition konzentrierter Kozustände. In [25] findet sich zudem eine numerische Analyse der genäherten Eigenwerte der Wellengleichung. Die folgenden Simulationsergebnisse stützen die Feststellung, dass eine *Upwind*-Parametrierung mit einem leicht negativen Wert von α sehr gute Näherungen produziert. Bezogen auf den Fall $\alpha = 0$ ergeben sich vergleichbare Ergebnisse bei halber Anzahl von Diskretisierungsintervallen.

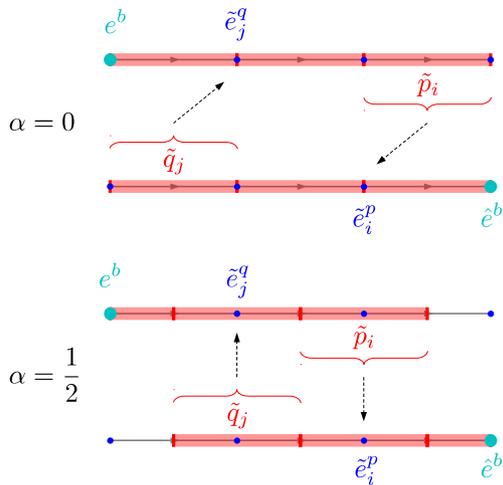


Abb. 1. Durch Variation von α verändert sich die Gewichtung der konzentrierten Erhaltungsgrößen, über die die Zustandsvektoren \tilde{p} und \tilde{q} definiert sind. Dies lässt sich auch als eine Verschiebung der Bilanzgebiete interpretieren, die der Berechnung der konzentrierten Zustände \tilde{e}^p und \tilde{e}^q in den Knoten zugrunde liegen.

4.3.2 Lösung eines Anfangswertproblems

Betrachtet werde die 1D-Wellengleichung mit Ausbreitungsgeschwindigkeit $c = 1$, homogenen Randbedingungen $e^\partial = \hat{e}^\partial = 0$ und der Anfangsbedingung

$$p_0 = e^{-\frac{(z-0,5)^2}{0,025^2}} dz, \quad q_0 = 0, \quad z \in (0, 1). \quad (68)$$

Die Lösung in charakteristischen Variablen $\eta = \frac{1}{2}(p - q)$ und $\xi = \frac{1}{2}(p + q)$ ergibt auf unbeschränktem Gebiet eine links- und eine rechtslaufende Transportgleichung

$$\eta(z, t) = \eta_0(z + t), \quad \xi(z, t) = \xi_0(z - t), \quad (69)$$

die die Anfangsbedingungen

$$\eta_0(z) = \xi_0(z) = \frac{1}{2}p_0(z) \quad (70)$$

verschiebt. Auf dem beschränkten Gebiet $\Omega = (0, 1)$ finden Reflexionen an den Rändern (rechts mit Vorzeichenwechsel) statt, so dass

$$p(z, 2) = -p_0(z), \quad q(z, 2) = 0 \quad (71)$$

die exakte Lösung zum Zeitpunkt $t = 2$ ist. Diese ist in Abb. 2 gepunktet dargestellt. Daneben sind die numerischen Lösungen mit der einseitigen Näherung durch $\alpha = 0$ für $N = 160$ (1) und $N = 320$ (2) (punkt-)strichliert dargestellt sowie die Lösung für $N = 160$ und $\alpha = -1/6$ (3). Diese Parametrierung erzeugt bei gleichem Gitter deutlich weniger Dispersion als (1) und ist mit der Lösung (2) vergleichbar, die auf einem doppelt so feinen Gitter beruht.

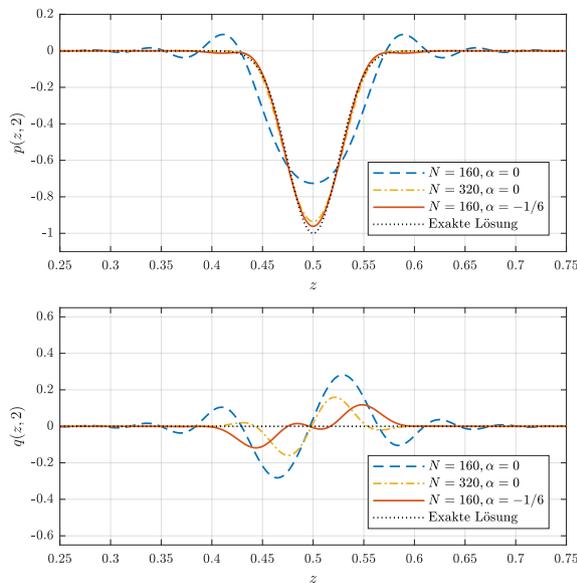


Abb. 2. Näherungen der Lösung $p(z, 2) = -p_0(z)$ und $q(z, 2) = q_0(z) = 0$ nach jeweils zweifacher Reflexion an den Rändern.

5 Approximation der 1D-Wärmeleitungsgleichung

Die Diskretisierung der Stokes-Dirac-Struktur und die konsistente Näherung der Konstitutivgleichungen lassen sich zur strukturerhaltenden Diskretisierung der Wärmeleitungsgleichung nutzen. Zu berücksichtigen sind die ggf.

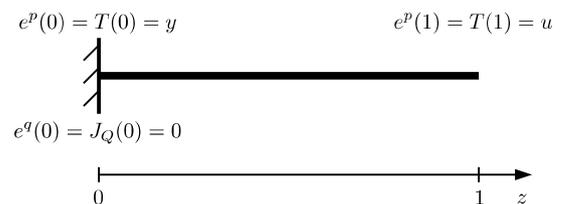


Abb. 3. Wärmeleiter mit aufgeprägter und homogener Randbedingung $T(1) = u$, $J_Q(0) = 0$ und flachem Ausgang $T(0) = y$.

unterschiedlichen Vorzeichen in den Struktur- und Konstitutivgleichungen. Bei homogener Randbedingung am linken Rand $e^\partial = 0$ und rechts aufgeprägter Randbedingung $\hat{e}^\partial = u$ ergibt sich eine Zustandsdifferentialgleichung für $\mathbf{x} = \tilde{\mathbf{p}}$ der Form

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{A}\mathbf{x} + \mathbf{b}u. \quad (72)$$

Die Situation entspricht einem linksseitig isolierten Wärmeleiter mit am rechten Rand aufgeprägter Temperatur, wie in Abb. 3 illustriert. Es ergeben sich Zustandsmatrix und Eingangsvektor als

$$\mathbf{A} = -\mathbf{J}_q^T \mathbf{Q}_q \mathbf{J}_q \mathbf{Q}_p, \quad \mathbf{b} = \mathbf{J}_p \mathbf{Q}_q \mathbf{B}_q \quad (73)$$

mit den darin enthaltenen Matrizen gemäß (47) und analog zu (65), wobei die Werte von c_v und λ zu berücksichtigen sind. Es ist bekannt, siehe z. B. [22], dass die Temperatur am linken Rand, also $f^\partial = e^p(0)$ ein *flacher Ausgang* ist, über den sich Zustands- und Eingangsgrößen parametrieren lassen. Die diskrete Ausgangsgleichung lautet entsprechend

$$y = \mathbf{c}^T \mathbf{x}, \quad \mathbf{c}^T = [1 \ 0 \ \dots \ 0] \mathbf{Q}_p. \quad (74)$$

Die resultierenden endlich-dimensionalen Zustandsraummodelle werden im Folgenden hinsichtlich ihrer Eigenwerte und der Erhaltung der Flachheit des Ausgangs für die Parametrierungen $\alpha = 0$ und $\alpha = \frac{1}{2}$ untersucht. Die Festlegung auf diese Parameter liegt daran, dass ausschließlich in diesen Fällen das Zählerpolynom der Übertragungsfunktion von u nach y eine Konstante ist (im zweiten Fall tritt Pol-/Nullstellenkürzung auf, vgl. das unbeobachtbare Teilsystem von (80)), was jeweils eine differentielle Parametrierung des Eingangs ermöglicht.

Im Weiteren werden konstante Wärmekapazität und -leitfähigkeit $c_v = \lambda = 1$ angenommen.

5.1 Eigenwerte und invariante Nullstellen

Die Randbedingungen $e^\partial = \hat{e}^\partial = 0$ in der strukturierten Darstellung entsprechen homogenen Neumann-Dirichlet Randbedingungen in der Formulierung (17) der Wärmeleitungsgleichung. Die Eigenwerte ergeben sich zu

$$\lambda_{k,\infty} = -\left(\frac{2k-1}{2}\pi\right)^2, \quad k \in \mathbb{N}, \quad (75)$$

siehe z. B. [33]. Für die beiden genannten Parametrierungen von α werden die Zustandsmatrizen jeweils tridiagonal, was die analytische Ermittlung ihrer Eigenwerte ermöglicht. Hierzu werden die charakteristischen Polynome wie die Tschebyscheff-Polynome rekursiv aufgestellt

und ihre Nullstellen über geeignete Variablentransformationen ermittelt. Details hierzu sind in [34] dargestellt.

$\alpha = 0$. Die Systemmatrizen des Zustandsraummodells haben die Gestalt

$$\mathbf{A} = N^2 \begin{bmatrix} -1 & 1 & & & \\ 1 & -2 & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & 1 & -2 \\ & & & & 1 & -2 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{b} = N \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{c}^T = N [1 \ 0 \ \dots \ 0]. \quad (76)$$

Als Eigenwerte von \mathbf{A} ergeben sich

$$\lambda_k = 2N^2 \left(\cos\left(\frac{2k-1}{2N+1}\pi\right) - 1 \right), \quad k = 1, \dots, N. \quad (77)$$

Sie stellen aufgrund der Abschätzung

$$\lambda_k = \lambda_{k,\infty} \left(1 - \frac{1}{N} + o\left(\frac{1}{N}\right) \right) \quad (78)$$

eine Näherung erster Ordnung der Eigenwerte des verteilt-parametrischen Systems dar, siehe auch [33]. Aus der Struktur der Rosenbrock-Matrix des Systems $(\mathbf{A}, \mathbf{b}, \mathbf{c}^T)$ ergeben sich keine invarianten Nullstellen. Das lineare System ist damit steuer- und beobachtbar und $y = \mathbf{c}^T \mathbf{x}$ stellt einen flachen Ausgang dar.

$\alpha = \frac{1}{2}$. Die Zustandsmatrix \mathbf{A} weist eine Schachbrettstruktur auf. Für geradzahliges N lässt sich das Zustandsraummodell in den Teilständen

$$\mathbf{x}_1 = [x_1 \ x_3 \ \dots \ x_{N-1}]^T, \quad \mathbf{x}_2 = [x_2 \ x_4 \ \dots \ x_N]^T \quad (79)$$

als

$$\begin{bmatrix} \dot{\mathbf{x}}_1 \\ \dot{\mathbf{x}}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{A}_1 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{A}_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{x}_1 \\ \mathbf{x}_2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \mathbf{b}_1 \\ \mathbf{b}_2 \end{bmatrix} u \quad (80a)$$

$$y = [\mathbf{c}_1^T \ \mathbf{c}_2^T] \begin{bmatrix} \mathbf{x}_1 \\ \mathbf{x}_2 \end{bmatrix} \quad (80b)$$

schreiben. Darin sind

$$\mathbf{A}_1 = \left(\frac{N}{2}\right)^2 \begin{bmatrix} -2 & 1 & & & \\ 2 & -2 & 1 & & \\ & 1 & -2 & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & 1 \\ & & & & 1 & -2 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{A}_2 = \left(\frac{N}{2}\right)^2 \begin{bmatrix} -1 & 1 & & & \\ 1 & -2 & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & 1 & -2 & 1 \\ & & & & 1 & -3 \end{bmatrix} \quad (81)$$

ähnliche Matrizen mit identischen Eigenwerten und

$$\mathbf{b}_1 = N \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \frac{1}{4} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{b}_2 = N \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \frac{1}{2} \end{bmatrix},$$

$$\mathbf{c}_1^T = N [2 \quad 0 \quad \dots \quad 0], \quad \mathbf{c}_2^T = \mathbf{0}^T. \quad (82)$$

Es ergeben sich die jeweils doppelten Eigenwerte

$$\lambda_k = \frac{N^2}{2} \left(\cos\left(\frac{2k-1}{N}\pi\right) - 1 \right), \quad k = 1, \dots, \frac{N}{2}, \quad (83)$$

die mit der Abschätzung

$$\lambda_k = \lambda_{k,\infty} \left(1 + \frac{2\lambda_{k,\infty}}{4! \left(\frac{N}{2}\right)^2} + o\left(\frac{1}{\left(\frac{N}{2}\right)^2}\right) \right) \quad (84)$$

eine Näherung zweiter Ordnung von (75) darstellen.

Während das erste Teilsystem von (80) steuer- und beobachtbar ist, ist das zweite Teilsystem am Ausgang $y = \mathbf{c}_1^T \mathbf{x}_1$ unbeobachtbar. Da beide Subsysteme identische Eigenwerte haben, tritt nur jeweils einer im Übertragungsverhalten von u nach y auf. Zwar ist y nun kein flacher Ausgang für das Gesamtsystem, jedoch für das erste Teilsystem, das vom unbeobachtbaren zweiten – wenigstens im linearen Fall – vollständig entkoppelt ist.

5.2 Lösung eines Anfangswertproblems

In Abb. 4 werden exakte und numerische Lösung der Wärmeleitungsgleichung (17) für $k = \frac{\lambda}{c_v} = 1$ verglichen. Die Anfangsbedingung besteht aus der dritten Eigenform

$$x_0(z) = x(z, 0) = \cos\left(\frac{5}{2}\pi z\right), \quad (85)$$

die mit dem dritten Eigenwert abklingt und somit zur Zeit $t_e = \ln 4 / \left(\frac{5}{2}\pi\right)^2$ die exakte Lösung

$$x(z, t_e) = e^{-\frac{25}{4}\pi^2 t_e} x_0(z) = \frac{1}{4} x_0(z) \quad (86)$$

ergibt. Deutlich zu erkennen ist in Abb. 4 die Überlegenheit der Approximation mit einer zentrierten Näherung durch die Parameterwahl $\alpha = \frac{1}{2}$, die im Vergleich zu $\alpha = 0$ einen deutlich geringeren Fehler mit einem günstigeren örtlichen Verlauf aufweist.

5.3 Flachheitsbasierte Steuerung

Die in [22] vorgestellte flache Parametrierung des Eingangs (Temperatur am rechten Rand) durch den Ausgang

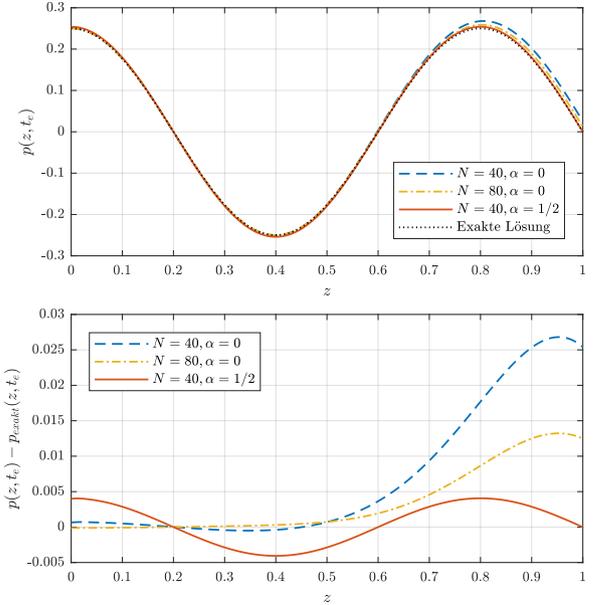


Abb. 4. Oben: Exakte und numerische Lösung des Anfangswertproblems für die Wärmeleitungsgleichung. Unten: Fehler zwischen numerischer und exakter Lösung für verschiedene Parameter.

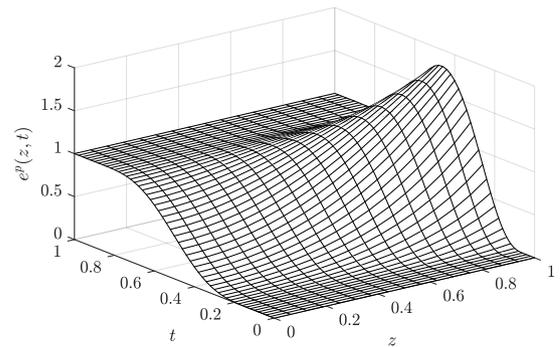


Abb. 5. Simulation der Steuerung mit vorgegebenem Arbeitspunktwechsel von $y = T(0) = e^p(0)$ (geglättete Sprungfunktion mit Parameter $\gamma = 1, 1$, Gevrey-Ordnung $1 + \frac{1}{1,1} < 2$). Steuerungsentwurf mit $N = 40$, $\alpha = \frac{1}{2}$ und 10 Zeitableitungen von $y^*(t)$. Simulation mit $N_{sim} = 160$, $\alpha = \frac{1}{2}$.

(Temperatur am linken Rand)

$$u^*(t) = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{(2j)!} \partial_t^j y^*(t) \quad (87)$$

beruht auf der unendlichen Reihenentwicklung der umgekehrten Laplace-Transformierten der nichtrationalen Übertragungsfunktion $\frac{1}{\cosh(\sqrt{s})}$. Die erforderliche unendliche Differenzierbarkeit des gewünschten Ausgangs $y^*(t)$ wird durch Funktionen der Gevrey-Klasse erfüllt. Der Arbeitspunktwechsel des Ausgangs $y^*(t) = x^*(0, t)$ von $y^*(0) = 0$ nach $y^*(T) = 1$ wird mit $y^*(\tau) = \Theta_\omega(\tau)$, $\tau = \frac{t}{T}$, durch die geglättete Sprungfunktion

$$\Theta_\omega(\tau) = \begin{cases} 0 & \tau \leq 0 \\ \int_0^\tau \theta_\omega(s) ds & \tau \in (0, 1) \\ \int_0^1 \theta_\omega(s) ds & \tau \geq 1 \end{cases} \quad (88)$$

auf dem normierten Zeitintervall $\tau \in (0, 1)$ parametrisiert. $\theta_\omega(\tau)$ ist die glockenförmige Impulsfunktion

$$\theta_\omega(\tau) = \begin{cases} 0 & \tau \notin (0, 1) \\ \exp(-[(1-\tau)\tau]^{-\omega}) & \tau \in (0, 1). \end{cases} \quad (89)$$

Für die Wahl des Parameters $0 < \omega < 1$, ist mit $\gamma = 1 + \frac{1}{\omega}$ die Solltrajektorie eine Funktion der Gevrey-Klasse $1 < \gamma < 2$. Konvergenz der Potenzreihe (87) mit unendlichem Konvergenzradius ist für $\gamma < 2$ sichergestellt [20].

Im numerischen Experiment wird ein Simulationsmodell mit $\alpha = \frac{1}{2}$, $N_{sim} = 160$ gewählt, das mit dem Matlab-Befehl `lsim` und einer Zeitschrittweite von 10^{-5} integriert wird. Als Parameter der Solltrajektorie werden $T = 1$ und $\omega = 1,1$ gewählt, entsprechend $\gamma = 1 + \frac{1}{1,1} < 2$. Die Potenzreihe (87) zur Berechnung der flachen Eingangparametrierung wird nach der 10. Zeitableitung von $y^*(t)$ abgebrochen. Die so ermittelte Steuerung wird mit $u_\infty^{10}(t)$ bezeichnet. Zum Vergleich werden Steuerungen auf Basis der Inversion der Übertragungsfunktionen $\mathbf{c}^T(s\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}\mathbf{b}$ für $\alpha = 0$ und $\mathbf{c}_1^T(s\mathbf{I} - \mathbf{A}_1)^{-1}\mathbf{b}_1$ für $\alpha = \frac{1}{2}$ berechnet. Die ermittelte Steuerung $u^*(t)$ ist dann eine endliche Summe von $y^*(t)$ und den Zeitableitungen. Diese wird ebenfalls nach den ersten 10 (bzw. 5) Zeitableitungen abgeschnitten und die entsprechenden Steuerungen werden mit $u_N^{5/10}(t)$ bezeichnet, wobei tiefgestellt die Ordnung N des Entwurfsmodells und hochgestellt die Anzahl der verwendeten Zeitableitungen des flachen Ausgangs angegeben ist.

Abbildung 5 illustriert, entsprechend Abb. 2 in [22], die Lösung $\mathbf{e}^p(t) = \mathbf{Q}_p \tilde{\mathbf{p}}(t)$ (Temperaturen in den Knoten) über der Zeit- und Ortsvariable für den aufgeprägten Temperaturtransienten $u_{40}^{10}(t)$ am rechten Rand. In

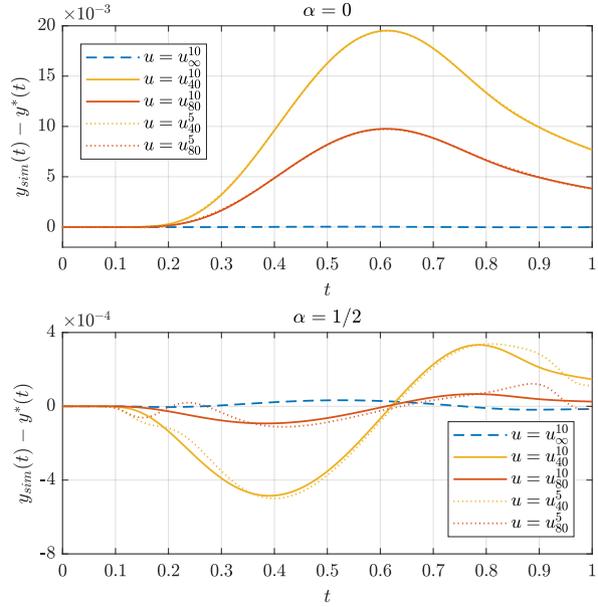


Abb. 6. Ausgangsfehler unter flachheitsbasierter Vorsteuerung, Simulationsmodell mit $N_{sim} = 160$, $\alpha = \frac{1}{2}$. u_∞^{10} : Berechnung der Steuerung gemäß (87), Abbruch nach der 10. Ableitung von $y^*(t)$. $u_{40/80}^{5/10}$: Berechnung der Steuerung auf Basis des diskretisierten Modells mit $N = 40$ bzw. $N = 80$ und 5 bzw. 10 Zeitableitungen von $y^*(t)$.

Abb. 6 wird der simulierte Ausgang mit der vorgegebenen Referenztrajektorie verglichen, oben für $\alpha = 0$, unten für $\alpha = \frac{1}{2}$. Dabei wird das Gitter variiert, $N \in \{40, 80\}$, und die Anzahl verwendeter Ableitungen des flachen Ausgangs (10 bzw. 5). Die unterschiedliche Fehlerordnung (1 bzw. 2) lässt sich aus den Kurven ablesen, ebenso wie die abnehmende Auswirkung von Ableitungen des flachen Ausgangs höherer Ordnung.

6 Schlussbemerkungen

Vorgestellt wurde ein Verfahren zur strukturerhaltenden Ortsdiskretisierung von hyperbolischen Systemen zweier Erhaltungsgleichungen in beliebiger Ortsdimension. Das Verfahren ist ebenso anwendbar für parabolische Systeme (mit nur einer Erhaltungsgleichung), die sich durch vergleichbare Strukturgleichungen darstellen lassen. Anhand der eindimensionalen Wellen- und Wärmeleitungsgleichung wurde die konkrete Anwendung illustriert und es wurden numerische Eigenschaften der endlich-dimensionalen Näherungsmodelle herausgearbeitet. Für gute numerische Näherungen lässt sich die Natur der betrachteten Systeme durch geeignete Parametrierung des Verfahrens berücksichtigen. Die Interpreta-

tion der Parameterwerte führt auf die bekannten Tatsachen, dass bei hyperbolischen Systemen die Bevorzugung der Richtung des Informationsflusses günstig ist (*upwindig*), während für parabolische Probleme eine zentrierte Näherung der Konstitutivgleichungen zu bevorzugen ist. Weiterhin ist mit der gezeigten Diskretisierungsmethode auch Strukturhaltung im Hinblick auf den Steuerungsentwurf möglich, was am Beispiel einer flachheitsbasierten Steuerung für die eindimensionale Wärmeleitungsgleichung illustriert wurde. Die (auf der Struktur der Zustandsraummodelle basierende) Analyse der Erhaltung von Flachheit auf mehrdimensionalen Ortsgebieten und für Klassen flacher Ausgänge, wie z. B. in [23] beschrieben, ist Gegenstand der laufenden Arbeit.

Für eine breitere Anwendbarkeit des vorgestellten Ansatzes wird an der Umsetzung in FE-Software wie FEniCS [35] gearbeitet, um numerische Modelle komplexerer Systeme (mit Konvektion *und* Diffusion sowie Nichtlinearitäten) auf nicht-trivialen Geometrien zu erzeugen. Zusammen mit entsprechenden Diskretisierungen etwa strukturmechanischer Systeme kann so eine torbasierte Modellbibliothek für Simulation und numerischen Steuerungs- und Regelungsentwurf multiphysikalischer Systeme entstehen.

A Differentialformen

Dieser Anhang stellt eine knappe Übersicht der wichtigsten Rechenregeln mit Differentialformen vor. Als Referenzen seien [36] und die entsprechenden Abschnitte von [37] empfohlen. Für Funktionenräume von Differentialformen wird auf [38] verwiesen.

Differentielle k -Formen sind per Definition k -lineare, alternierende Abbildungen von k Vektorfeldern in einem Punkt des Tangentialraums einer differenzierbaren Mannigfaltigkeit (wir betrachten ausschließlich $\Omega \subset \mathbb{R}^n$) auf die reellen Zahlen. $\Lambda^k(\Omega)$ bezeichnet den Raum der differentiellen k -Formen mit glatten Koeffizientenfunktionen über Ω , dessen Basis sich aus den k -fachen äußeren Produkten (siehe weiter unten) der Differentiale $\{dz_1, dz_2, \dots, dz_n\}$ ergibt. Differentielle k -Formen enthalten (salopp gesprochen) bereits die erforderlichen Differentiale für die Integration und erlauben eine *koordinatenfreie* Darstellung der Integration über k -dimensionale Ortsgebiete. Ein Vorteil der Verwendung von Differentialformen liegt in einem einheitlichen Differentialoperator $d : \Lambda^k(\Omega) \rightarrow \Lambda^{k+1}(\Omega)$. Die *äußere Ableitung* d erfüllt die Komplex-Eigenschaft $d \circ d = 0$ und erlaubt die einheitliche Formulierung der verschiedenen Integralsätze durch

den verallgemeinerten Satz von Stokes

$$\int_{\Omega} d\omega = \int_{\partial\Omega} \text{tr } \omega, \quad \forall \omega \in \Lambda^{k-1}(\Omega). \quad (90)$$

Der Spuroperator tr definiert die Fortsetzung von ω auf dem Rand des offenen Gebietes. Beim Rechnen mit Differentialformen $\lambda \in \Lambda^k(\Omega)$, $\mu \in \Lambda^l(\Omega)$ sind die Regeln

$$\lambda \wedge \mu = (-1)^{kl} \mu \wedge \lambda, \quad (91)$$

$$d(\lambda \wedge \mu) = d\lambda \wedge \mu + (-1)^k \lambda \wedge d\mu, \quad (92)$$

zu beachten, wobei $\wedge : \Lambda^k(\Omega) \times \Lambda^l(\Omega) \rightarrow \Lambda^{k+l}(\Omega)$ das alternierende *äußere Produkt* oder Keilprodukt darstellt. Mit dem Satz von Stokes erhält man für $\lambda \in \Lambda^k(\Omega)$ und $\mu \in \Lambda^{n-k-1}(\Omega)$ die partielle Integrationsformel

$$\langle d\lambda | \mu \rangle_{\Omega} = \langle \text{tr } \lambda | \text{tr } \mu \rangle_{\partial\Omega} - (-1)^k \langle \lambda | d\mu \rangle_{\Omega}, \quad (93)$$

wobei

$$\langle \lambda | \nu \rangle_{\Omega} := \int_{\Omega} \lambda \wedge \nu \quad (94)$$

das *Dualitätsprodukt* oder die *natürliche Paarung* zweier Differentialformen $\lambda \in \Lambda^k(\Omega)$ und $\nu \in \Lambda^{n-k}(\Omega)$ abkürzt. Der *Hodge-Stern-Operator* $*$: $\Lambda^k(\Omega) \rightarrow \Lambda^{n-k}(\Omega)$ erlaubt es, ein inneres Produkt, z. B. das L^2 -Produkt $\langle \alpha, \beta \rangle_{\Omega}$ zweier Differentialformen $\alpha, \beta \in \Lambda^k(\Omega)$ mit Koeffizientenfunktionen α_i, β_i durch das Dualitätsprodukt auszudrücken:

$$\langle \alpha, \beta \rangle_{\Omega} = \int_{\Omega} \sum_i \alpha_i \beta_i d\Omega =: \langle \alpha | * \beta \rangle_{\Omega}. \quad (95)$$

Die zweimalige Anwendung des Hodge-Operators auf $\alpha \in \Lambda^k(\Omega)$ ändert ggf. das Vorzeichen:

$$* * \alpha = (-1)^{k(n-k)} \alpha. \quad (96)$$

Die musikalischen Isomorphismen \flat und \sharp erzeugen aus einer 1-Form ein Vektorfeld mit identischen Komponenten und umgekehrt. Unter Beachtung der dargestellten Rechenregeln lassen sich die Differentialoperatoren aus der Vektorrechnung wie folgt ausdrücken:

$$\text{grad} = (df)^{\sharp}, \quad \text{rot } \mathbf{g} = (* (d\mathbf{g}^{\flat}))^{\sharp}, \quad \text{div } \mathbf{g} = *d(*\mathbf{g}^{\flat}). \quad (97)$$

Danksagung: Teile der Arbeit entstanden an der Universität Claude Bernard Lyon 1, CNRS, LAGEP UMR 5007, Frankreich mit Förderung durch die Europäische Kommission, Horizon 2020 Marie Skłodowska-Curie Individual Fellowship, Projekt Nr. 655204, und die Agence Nationale de la Recherche (ANR), Projekt INFIDHEM, ID ANR-16-CE92-0028. Weitere Teile der Arbeit entstanden im Rahmen des DFG-Vorhabens *Steuerung und Regelung verteilt-parametrischer Systeme auf Basis diskretisierter Port-Hamiltonscher Modelle*, Geschäftszeichen KO 4750/1-1.

Literatur

- [1] V. Duindam, A. Macchelli, S. Stramigioli, and H. Bruyninckx. *Modeling and Control of Complex Physical Systems: The Port-Hamiltonian Approach*. Springer Science & Business Media, 2009.
- [2] A. J. van der Schaft, D. Jeltsema, et al. Port-Hamiltonian Systems Theory: An Introductory Overview. *Foundations and Trends® in Systems and Control*, 1(2-3):173–378, 2014.
- [3] R. Ortega and E. García-Canseco. Interconnection and Damping Assignment Passivity-Based Control: A survey. *European Journal of Control*, 10(5):432–450, 2004.
- [4] R. Ortega, A. J. van der Schaft, F. Castaños, and A. Astolfi. Control by Interconnection and standard passivity-based control of port-Hamiltonian systems. *IEEE Transactions on Automatic Control*, 53(11):2527–2542, 2008.
- [5] A. Macchelli and C. Melchiorri. Control by interconnection of mixed port Hamiltonian systems. *IEEE Transactions on Automatic Control*, 50(11):1839–1844, 2005.
- [6] A. Siuka, M. Schöberl, K. Rieger, and K. Schlacher. Regelung verteilt-parametrischer Hamiltonscher Systeme auf Basis struktureller Invarianten. *at–Automatisierungstechnik*, 59(8):465–478, 2011.
- [7] A. Macchelli, Y. Le Gorrec, H. Ramírez, and H. Zwart. On the synthesis of boundary control laws for distributed port-Hamiltonian systems. *IEEE Transactions on Automatic Control*, 62(4):1700–1713, 2017.
- [8] A. J. van der Schaft and B. M. Maschke. Hamiltonian formulation of distributed-parameter systems with boundary energy flow. *Journal of Geometry and Physics*, 42(1):166–194, 2002.
- [9] A. Baaiu, F. Couenne, D. Eberard, Ch. Jallut, L. Lefèvre, Y. Le Gorrec, and B. Maschke. Port-based modelling of mass transport phenomena. *Mathematical and Computer Modelling of Dynamical Systems*, 15(3):233–254, 2009.
- [10] Markus Schöberl. Differentialgeometrische Beschreibung und Analyse Tor-basierter Hamilton'scher Systeme. *at – Automatisierungstechnik*, 63(9):672–683, 2015.
- [11] G. Golo, V. Talasila, A. van der Schaft, and B. Maschke. Hamiltonian discretization of boundary control systems. *Automatica*, 40(5):757–771, May 2004.
- [12] R. Moulla, L. Lefèvre, and B. Maschke. Pseudo-spectral methods for the spatial symplectic reduction of open systems of conservation laws. *Journal of Computational Physics*, 231(4):1272–1292, 2012.
- [13] O. Farle, R.-B. Baltes, and R. Dyczij-Edlinger. Struktur-erhaltende Diskretisierung verteilt-parametrischer Port-Hamiltonscher Systeme mittels finiter Elemente. *at–Automatisierungstechnik*, 62(7):500–511, 2014.
- [14] M. Seslija, J. M. A. Scherpen, and A. J. van der Schaft. Explicit simplicial discretization of distributed-parameter port-Hamiltonian systems. *Automatica*, 50(2):369–377, 2014.
- [15] P. Kotyczka. Finite volume structure-preserving discretization of 1D distributed-parameter port-Hamiltonian systems. *IFAC-PapersOnLine*, 49(8):298–303, 2016. 2nd IFAC Workshop on Control of Systems Governed by Partial Differential Equations CPDE 2016 Bertinoro, Italy, 13–15 June 2016.
- [16] V. Trenchant, H. Ramírez, Y. Le Gorrec, and P. Kotyczka. Structure preserving spatial discretization of 2D hyperbolic systems using staggered grids finite difference. In *American Control Conference (ACC)*, pages 2491–2496. IEEE, 2017.
- [17] M. Fliess, J. Lévine, Ph. Martin, and P. Rouchon. Flatness and defect of non-linear systems: introductory theory and examples. *International Journal of Control*, 61(6):1327–1361, 1995.
- [18] Ralf Rothfuß, Joachim Rudolph, and Michael Zeitz. Flachheit: ein neuer zugang zur steuerung und regelung nichtlinearer systeme. *at – Automatisierungstechnik*, 45(11):517–525, 1997.
- [19] Michael Zeitz. Differenzielle flachheit: Eine nützliche methodik auch für lineare siso-systemedifferential flatness: A useful method also for linear siso systems. *at – Automatisierungstechnik*, 58(1):5–13, 2010.
- [20] Alan F Lynch and Joachim Rudolph. Flachheitsbasierte randsteuerung parabolischer systeme mit verteilten parametern. *at – Automatisierungstechnik*, 48(10):478–486, 2000.
- [21] Thomas Meurer and Michael Zeitz. Flachheitsbasierte steuerung und regelung eines wärmeleitungssystems. *at – Automatisierungstechnik*, 52(9/2004):411–420, 2004.
- [22] B. Laroche, Ph. Martin, P. Rouchon, et al. Motion planning for the heat equation. *International Journal of Robust and Nonlinear Control*, 10(8):629–643, 2000.
- [23] Thomas Meurer. Flatness-based trajectory planning for diffusion–reaction systems in a parallelepipedon – a spectral approach. *Automatica*, 47(5):935 – 949, 2011.
- [24] Timo Böhm and Thomas Meurer. Trajectory planning and tracking control for the temperature distribution in a deep drawing tool. *Control Engineering Practice*, 64:127–139, 2017.
- [25] P. Kotyczka, B. Maschke, and L. Lefèvre. Weak form of Stokes–Dirac structures and geometric discretization of port-Hamiltonian systems. *Journal of Computational Physics*, 361:442–476, 2018.
- [26] E. Tonti. A direct discrete formulation of field laws: The cell method. *CMES - Computer Modeling in Engineering and Sciences*, 2(2):237–258, 2001.
- [27] J. Krefft and M. Gerritsma. Mixed mimetic spectral element method for Stokes flow: A pointwise divergence-free solution. *Journal of Computational Physics*, 240:284–309, 2013.
- [28] R. R. Hiemstra, D. Toshniwal, R. H. M. Huijsmans, and M. I. Gerritsma. High order geometric methods with exact conservation properties. *Journal of Computational Physics*, 257:1444–1471, 2014.
- [29] H. Whitney. Geometric integration theory. *Princeton UP, Princeton*, 1957.
- [30] Arjan van der Schaft. *L2-Gain and Passivity Techniques in Nonlinear Control*. Springer, 3rd edition edition, 2017.
- [31] Th. J. Courant. Dirac manifolds. *Transactions of the American Mathematical Society*, 319(2):631–661, 1990.
- [32] R. Specogna. Diagonal discrete Hodge operators for simplicial meshes using the signed dual complex. *IEEE Transactions on Magnetics*, 51(3):1–4, 2015.
- [33] Y. Le Gorrec, H. Peng, L. Lefèvre, B. Hamroun, and F. Couenne. Systèmes hamiltoniens à ports de dimension infinie: réduction et propriétés spectrales. *Journal Européen des Systèmes Automatisés (JESA)*, 45(7-10):645–664, 2011.

- [34] P. Kotyczka. Structured discretization of the heat equation: Numerical properties and preservation of flatness. In *23rd International Symposium on Mathematical Theory of Networks and Systems, Hong Kong*, 2018.
- [35] M. Alnæs, J. Blechta, J. Hake, A. Johansson, B. Kehlet, A. Logg, Ch. Richardson, J. Ring, M. E. Rognes, and G. N. Wells. The fenics project version 1.5. *Archive of Numerical Software*, 3(100):9–23, 2015.
- [36] H. Flanders. *Differential Forms with Applications to the Physical Sciences*, volume 197. Academic Press New York, 1963.
- [37] D. D. Holm. *Geometric mechanics: Dynamics and symmetry*. Imperial College Press, 2011.
- [38] D. Arnold, R. Falk, and R. Winther. Finite element exterior calculus: from Hodge theory to numerical stability. *Bulletin of the American Mathematical Society*, 47(2):281–354, 2010.