



B-スプライン展開による一般磁気座標の構築

Construction of Generalized Magnetic Coordinates by B-Spline Expansion

倉田道成（名古屋大学大学院工学研究科エネルギー理工学専攻）
等々力二郎（核融合科学研究所）

Michinari Kurata

Dept. of Energy Engineering and Science, Graduate School of Engineering, Nagoya University

and

Jiro Todoroki

National Institute for Fusion Science

Abstract

Generalized Magnetic Coordinates (GMC) are curvilinear coordinates (ξ, η, ζ) , in which the magnetic field is expressed in the form

$$\mathbf{B} = \nabla\Psi(\xi, \eta, \zeta) \times \nabla\zeta + H^{\zeta}(\xi, \eta) \nabla\xi \times \nabla\eta.$$

The coordinates are expanded in Fourier series in the toroidal direction and the B-spline function in other two dimensions to treat the aperiodic model magnetic field. The coordinates are well constructed, but are influenced by the boundary condition in the B-spline expansion.

Keywords:

generalized magnetic coordinates, GMC, magnetic flux coordinates, nested magnetic surface, breaking of magnetic surfaces, magnetic islands, ABC magnetic field, B-spline expansion

§ 1. 序論

浜田座標やブーザー(Boozer)座標[1,2]などでよく知られる磁気面を座標変数とする磁気面座標(flux coordinates)は、プラズマのMHD平衡や安定性の解析などに今日広く利用されている。これらの磁気面座標は座標変数として入れ子状の磁気面を必要とするが、磁気島による磁気面破壊や磁力線のカオス(chaos)領域、ストカスティック(stochastic)領域の存在のために、プラズマ中において生成可能な領域が限られる場合がある。従って、トーラス状のプラズマにおける最外殻磁気面の外側の領域のように本来入れ子状の磁気面が存在しない領域や大きな磁気島が発生して入れ子状の磁気面が破壊されている領域には生成できない。このような場合に、従来の磁気面座標を補完する座標として一般磁気座標(Generalized Magnetic Coordinates, 略してGMC)[3]が考案された。

一般磁気座標は、磁気面を座標変数としない座標系であるため、入れ子状の磁気面が存在しない領域に対しても生成可能な座標系である。そのため、一般磁気座標は磁気島により入れ子状の磁気面の一部が破壊されている領域や領域の一部に最外殻磁気面の外側の領域を含む場合に対しても生成可能である。一般磁気座標を構築するアルゴリズムは磁力線を追跡せずに磁気面を構成する新しいアルゴリズムであり、座標系の

変化に伴うベクトルポテンシャルの変換則から得られる[4,5]。

§2. 一般磁気座標の構成

一般磁気座標は曲線座標系であり、その座標変数を (ξ, η, ζ) と表すこととする。ヤコビアンを $\sqrt{g} = (\nabla\xi \cdot \nabla\eta \times \nabla\zeta)^{-1}$ 、磁場の反変成分を (B^ξ, B^η, B^ζ) 、磁場のベクトルポテンシャルの共変成分を (A_ξ, A_η, A_ζ) とし、磁場の誘導密度を $(H^\xi, H^\eta, H^\zeta) \equiv (\sqrt{g}B^\xi, \sqrt{g}B^\eta, \sqrt{g}B^\zeta)$ と定義すると、 H^ζ が ζ に依存しないとき、磁場は次式で表される。

$$\mathbf{B} = \nabla\Psi(\xi, \eta, \zeta) \times \nabla\zeta + H^\zeta(\xi, \eta) \nabla\xi \times \nabla\eta. \quad (1)$$

ここで、 Ψ はベクトルポテンシャルの共変成分 A_ζ である。もし A_ζ が ζ に依存しないならば、 $\mathbf{B} \cdot \nabla A_\zeta = 0$ となるので $A_\zeta(\xi, \eta) = \text{Const.}$ で表わされる面は厳密に磁気面を表わす。従って、 A_ζ の ζ に依存する部分は磁気面の破壊によるものと考えられる。そこで、 A_ζ の ζ 依存性が最小となるように一般磁気座標を構築することとする。ここで、ある物理量 F に対して、

$$\bar{F} \equiv \oint F d\zeta / \oint d\zeta, \quad \tilde{F} \equiv F - \bar{F}. \quad (2)$$

という記号を導入すると、一般磁気座標を構築するための条件は以下のように表される。

$$\text{条件1: } H^\zeta \text{ が } \zeta \text{ に依存しない} \Leftrightarrow \tilde{H}^\zeta = 0.$$

$$\text{条件2: } A_\zeta \text{ の } \zeta \text{ 依存性を最小にする} \Leftrightarrow \tilde{A}_\zeta \text{ を最小にする.}$$

条件1より、

$$\tilde{H}^\xi = \frac{\partial \tilde{A}_\zeta}{\partial \eta}, \quad \tilde{H}^\eta = -\frac{\partial \tilde{A}_\zeta}{\partial \xi} \quad (3)$$

と表せると仮定すれば、条件2は $\tilde{H}^\xi, \tilde{H}^\eta$ を最小にすることを意味する。また、 $\bar{A}_\zeta(\xi, \eta) = \text{Const.}$ で表わされる面を平均磁気面と呼ぶこととする。

これまでの報告[4-6]において、非軸対称な周期的なモデル磁場に対して座標を3次元方向にフーリエ展開することによってGMCが構築できることが示された。また、入れ子状の磁気面領域の一部に明らかな磁気島を含む場合でもGMCを構築できることが示された[6]。ここでは、さらに非周期的磁場や不連続性の大きい磁場を取り扱うために、局所的な台(Support)を持つ区分多項式関数であるB-スプライン関数を用いてGMCを生成した結果を報告する。

§3. 実験モデル

モデル磁場としてトポロジカルに非軸対称磁場を表現できる以下のようなABC(Arnol'd-Beltrami Childress)磁場を用いた。デカルト座標系 (x, y, z) において、

$$\begin{aligned} B_x &= b \cos(2\pi y) + c \sin(2\pi z), \\ B_y &= c \cos(2\pi z) + a \sin(2\pi x), \\ B_z &= a \cos(2\pi x) + b \sin(2\pi y) + B_0 \end{aligned} \quad (4)$$

この磁場は全ての方向に周期 1 を持っている。ここで $a=0.2, b=0.1, c=0.6$ と選び、 $B_z > 0$ となるように z -方向に一律な磁場 $B_0 = 1.0$ を加える。デカルト座標系を GMC の座標変数 (ξ, η, ζ) を用いて、

$$\begin{aligned} x &= \xi + \sum_{l,m,n} \xi_{l,m,n} B_l(\xi) B_m(\eta) \exp(2\pi i n \zeta), \\ y &= \eta + \sum_{l,m,n} \eta_{l,m,n} B_l(\xi) B_m(\eta) \exp(2\pi i n \zeta), \\ z &= \zeta. \end{aligned} \quad (5)$$

と展開して GMC を生成する。ここで、 $B_l(\xi), B_m(\eta)$ は各々図 1 に示されるような 3 次の B-スプライン関数であり、座標格子点と B-スプライン関数の節点は一致させている。GMC の座標変数 (ξ, η, ζ) の各変域はすべて区間 $[0, 1]$ とした。 $z = \zeta$ 方向がトロイダル方向に対応し、 ζ -方向にフーリエ展開し、残りの 2 次元方向に B-スプライン展開を行う。未知数である展開係数 $\xi_{l,m,n}, \eta_{l,m,n}$ を決定して座標を生成する。 ζ -方向のフーリエモードとしては $-L \leq n \leq L$ と表して、 $L = 10$ に固定した。フーリエモードの数を $L = 1$ から $L = 10$ に至るまで順次増やしていくと座標精度が良くなるが、それ以上モード数を増やしても座標はほとんど変化しなかったのがこのように固定した。また、トロイダル方向の $z = \zeta$ 方向は、40 メッシュに等分割した。この方向のメッシュ数を必要以上に増やしても座標は変化しなかったのが固定した。 (ξ, η) 方向の各メッシュ数 M をパラメータとして、 $M = 20 \sim 80$ まで変化させた。反復法により、座標系が十分収束するまで 15 回程度の繰り返し計算を行った。GMC において磁気面が ζ によらず (ξ, η) 平面上で一定の曲線となるように、すなわち磁気面が軸対称となるように座標系を構築した。

§ 4. 実験結果

図 4 は、デカルト座標系においてモデル磁場の磁力線のポアンカレ図とそれに対して生成した GMC の等間隔格子を重ねて示している。中央の入れ子状の磁気面に注目して GMC を生成し、 $z =$ 一定の平面として $z = 0, 0.25, 0.5, 0.75$ の 4 平面を代表して選んだ。磁気面の z 方向の変位に対応して GMC が生成されていることがわかる。

図 2 に $M = 40$ のとき GMC において得られた $\bar{A}_\zeta(\xi, \eta) = Const.$ で表わされる平均磁気面を示した。取り扱ったモデル磁場は、比較的磁気面破壊が少ない磁場であり、このような場合には、平均磁気面と磁気面はよく一致するはずである。 (ξ, η) 平面上で平均磁気面に沿って線積分を行うとさまざまな磁気面量を比較的簡単に計算できるが、その代表として回転変換を計算した。図 3 は、デカルト座標系において磁力線追跡から求めた回転変換と図 2 に示した平均磁気面から求めた回転変換を示したグラフである。グラフの横軸はそれぞれ各座標系において磁気軸から座標軸 ξ または x と同一方向に取った有向線分上での距離で、デカルト座標系においては $z = 0$ の平面上での距離である。このグラフを比較すると概形は一致していることがわかる。この平均磁気面から求めた回転変換は $M = 40$ の場合のものであり、 $M = 60$ 及び $M = 80$ の場合のそれと有効数字 2 桁以上一致していて、 M に対する依存性は少なかった。

次に H^ζ の ζ 依存性を評価するために、次のノルムを計算する。

$$I_\zeta = \int_0^1 \int_0^1 \int_0^1 |\bar{H}^\zeta|^2 d\xi d\eta d\zeta. \quad (6)$$

GMC は $\bar{H}^\zeta = 0$ を座標の必要条件としているので、本来 $I_\zeta = 0$ とならなければならない。従って、 I_ζ は座標生成の精度の尺度となる量である。また、 $\bar{H}^\xi, \bar{H}^\eta$ を評価するために、次のノルムを計算する。

$$I_{\xi} = \int_0^1 \int_0^1 \int_0^1 |\hat{H}^{\xi}|^2 d\xi d\eta d\zeta, \quad I_{\eta} = \int_0^1 \int_0^1 \int_0^1 |\hat{H}^{\eta}|^2 d\xi d\eta d\zeta. \quad (7)$$

GMCは $\hat{H}^{\xi}, \hat{H}^{\eta}$ が最小となるように構築されており、もし座標生成の精度が良ければ、 $\hat{H}^{\xi}, \hat{H}^{\eta}$ は入れ子状の磁気面が存在しない領域や磁気島による磁気面破壊を反映する量と考えられる。

座標格子点上での物理量をB-スプライン関数 $B_l(\xi), B_m(\eta)$ によって展開する場合、 (ξ, η) の各方向についてB-スプライン関数のモード l, m の数が座標格子点より2個多いために展開のための条件が不足する。そこで境界条件として座標境界での物理量の2階微分値=0と3階微分値=0という2種類の条件をそれぞれ課すことにした。実験ではいずれの境界条件を課した場合でも、他の領域と比較して座標境界近傍の数メッシュにおいて、 $I_{\xi}, I_{\eta}, I_{\zeta}$ が各々数桁大きくなった。その理由は明らかではない。そこで、座標境界での影響を取り除いた次のノルムを計算する。

$$\hat{I}_{\xi} = \int_0^1 \int_{0.1}^{0.9} \int_{0.1}^{0.9} |\hat{H}^{\xi}|^2 d\xi d\eta d\zeta, \quad \hat{I}_{\eta} = \int_0^1 \int_{0.1}^{0.9} \int_{0.1}^{0.9} |\hat{H}^{\eta}|^2 d\xi d\eta d\zeta, \quad \hat{I}_{\zeta} = \int_0^1 \int_{0.1}^{0.9} \int_{0.1}^{0.9} |\hat{H}^{\zeta}|^2 d\xi d\eta d\zeta. \quad (8)$$

図5に3階微分値=0の境界条件を課した場合の $I_{\xi}, I_{\eta}, I_{\zeta}$ 及び $\hat{I}_{\xi}, \hat{I}_{\eta}, \hat{I}_{\zeta}$ とメッシュ数 M との関係を示した。また、図6に2階微分値=0の境界条件を課した場合のそれを示した。座標境界部分を含むノルム $I_{\xi}, I_{\eta}, I_{\zeta}$ については、3階微分値=0の境界条件の場合の方が2階微分値=0の場合よりも小さい。しかし、座標境界部分を除いたノルム $\hat{I}_{\xi}, \hat{I}_{\eta}, \hat{I}_{\zeta}$ については $M=60$ ではほぼ同じ値となっているので結局、座標境界部分を取り除けば境界条件の影響はない。また、 $I_{\xi}, I_{\eta}, I_{\zeta}$ 及び $\hat{I}_{\xi}, \hat{I}_{\eta}, \hat{I}_{\zeta}$ は、 M に依存しなくなるまではほぼ同じ傾きで共に減少するが、これは座標を3次元方向にフーリエ展開した場合[4]と同様である。座標を3次元方向にフーリエ展開した場合と比較すると、 $\hat{I}_{\xi}, \hat{I}_{\eta}, \hat{I}_{\zeta}$ に着目すれば数桁減少しているので座標生成の精度が上がったことがわかる。図5を見ると、 $M=40$ 以上では $\hat{I}_{\xi}, \hat{I}_{\eta}, \hat{I}_{\zeta}$ は M に依存しなくなっているが、 \hat{I}_{ζ} が0に近づいて行かないのは座標生成精度の点から不都合な現象である。

そこでの (ξ, η) 平面上での分布を見るために次の ζ に関するノルムを計算する。

$$E_{\zeta}(\xi, \eta) = \int_0^1 |\hat{H}^{\zeta}|^2 d\zeta. \quad (9)$$

図7で E_{ζ} の鳥瞰図を、図8で E_{ζ} の等高線図を示す。但し、同様に座標境界での値を省いて示した。 $M=20$ のときは $(\xi, \eta) = (0.5, 0.55)$ の近くにある磁気軸に関してほぼ対称な形をしており、まだ減少できる可能性を示していると考えられる。 $M=40$ 以上では、どのパラメータでもほぼ同じ山の形となって、この頂上は磁気軸からずれた位置にあり、山は磁気軸に関して対称ではない。なお、山以外の背景の平地部分のオーダーは 10^{-14} である。この平地部分にも別の入れ子状の磁気面の一部が4個存在していることが図1よりわかるが、この部分は小さな値となっている。

また、 \bar{A}_{ζ} と磁気面破壊との関係を見るために次の ζ に関するノルムを計算する。

$$E_{\xi\eta}(\xi, \eta) = \int_0^1 \left(|\hat{H}^{\xi}|^2 + |\hat{H}^{\eta}|^2 \right) d\zeta. \quad (10)$$

図9で $E_{\xi\eta}$ の鳥瞰図を、図10で $E_{\xi\eta}$ の等高線図を示す。また E_{ζ} と同様に座標境界での値を省いて示した。 $M=20$ のときは座標生成の精度が悪く $\hat{H}^{\xi}, \hat{H}^{\eta}$ の中に座標生成における誤差を含んでしまうために、それがノイズとなって磁気面破壊による部分は明らかでない。 $M=40$ 以上では、 $E_{\xi\eta}$ の形状はほぼ同じ山の形となったが、座標をフーリエ展開した場合に最外郭磁気面の近傍で大きな値を持ったのとは全く異なった形状となった。山以外の背景の平地部分のオーダーは 10^{-15} であり、 E_{ζ} の場合と同様にこの部分は小さな値となっている。また、この山の頂上は磁気軸からずれた位置にあるが、 E_{ζ} の山の頂上とは異なる位置にある。座

標を3次元方向にフーリエ展開した場合には $E_{\xi\eta}$ と E_{ζ} とはかなり類似していたが、ここでは $E_{\xi\eta}$ の形状は E_{ζ} と少し似ている程度である。Mが大きくなると $E_{\xi\eta}$ の形状の解像度が上がるが、たとえM=80のときでさえ $E_{\xi\eta}$ はデルタ関数のように局所的な大小があるわけではなく、その点では磁気面破壊を反映する量として直接的に明らかに感じ取れるわけではない。すなわち、磁気面のある領域及び磁気島領域や磁気面が存在しない領域との関係はこのままでは明瞭ではない。この関係は平均磁気面上で $\bar{H}^{\xi}, \bar{H}^{\eta}$ のフーリエ成分を求めて、有理面との共鳴関係などを調べることによって明らかになるかもしれない。ここで取り扱ったモデル磁場は本来磁気面破壊が小さいものであったので、今後磁気島の存在が明らかにわかるようなより磁気面破壊が明らかな磁場を取り扱ってその関係を明らかにする必要がある。

§5. まとめ

非周期的磁場や不連続性の大きい磁場を取り扱うために、モデル磁場に対してトロイダル方向にフーリエ展開し、残りの2次元方向に3次のB-スプライン関数を用いた展開を行って一般磁気座標を構築した。B-スプライン関数による展開の際に課される境界条件の影響によって座標境界での座標生成の誤差は顕著に大きくなるが、座標境界を除けば良好に座標を生成できた。これまでの座標を3次元方向にフーリエ展開した場合と比較すると、座標生成の精度が向上した。

磁気面のある領域及び磁気島領域や磁気面が存在しない領域と一般磁気座標における量との関係は未だ解明できない。この点に関しては、磁気面破壊がより明らかな場合を取り扱うことと同時に平均磁気面上でのフーリエ成分などを考える新たなアプローチが必要である。

また、一般磁気座標で得られた平均磁気面を用いて回転変換を求めたが、メッシュ幅への依存性は少なく、比較的簡単に求められた。

Reference

- [1] S.Hamada: Nucl. Fusion **2**, 23 (1962).
- [2] A.Boozer: Phys. of Fluids **24**, 1999 (1981).
- [3] J.Todoroki: 核融合研究における数値解析手法と最適化(統計数理研究所共同研究レポート**105**), 1997, pp.1-10.
- [4] J.Todoroki and M.Kurata: 核融合研究における数値解析手法と最適化(統計数理研究所共同研究レポート**110**), 1998, pp.1-10.
- [5] M.Kurata and J.Todoroki: J. Plasma Fusion Res. SERIES, Vol. 1 (1998) 491-494.
- [6] M.Kurata and J.Todoroki: プラズマ閉じ込めに関連する数値計算手法の研究 NIFS-PROC-40 (1999) 9-18.

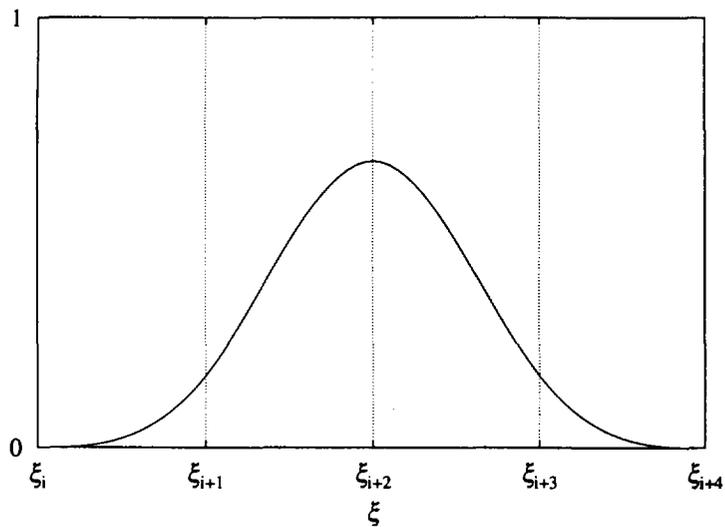


図1. 3次B-スプライン関数 $B_i(\xi)$.

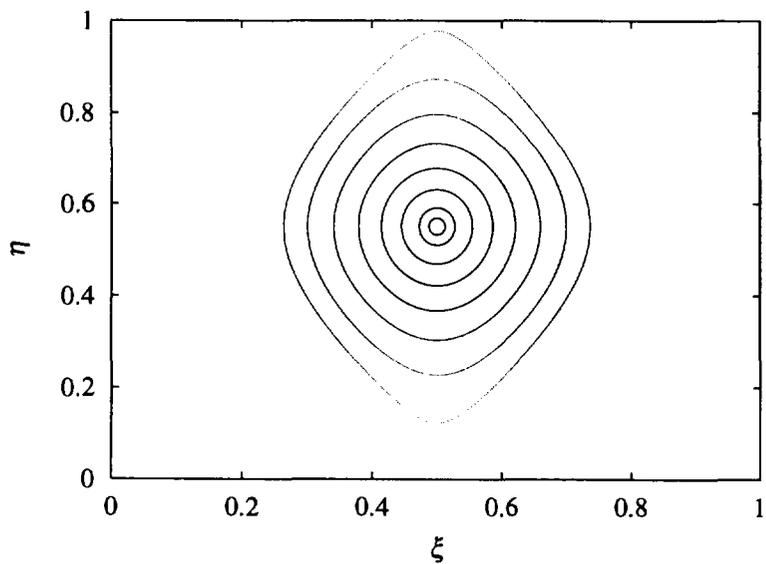
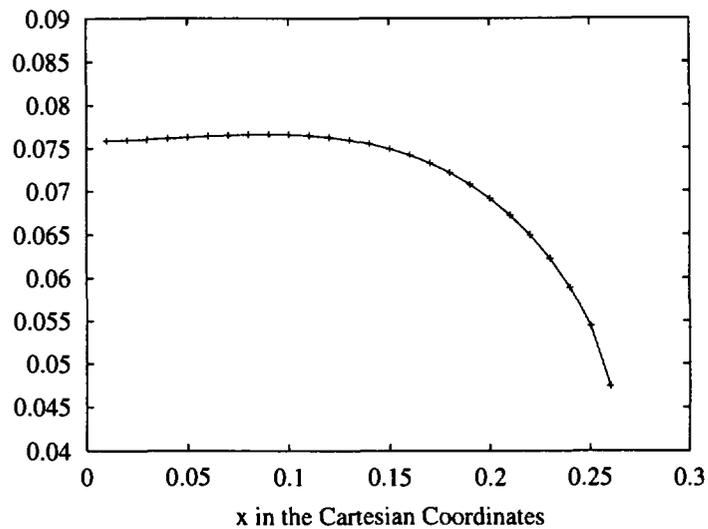


図2. GMCにおける \bar{A}_c の等高線.

(a) 磁力線追跡から求めた回転変換



(b) GMC平均磁気面から求めた回転変換

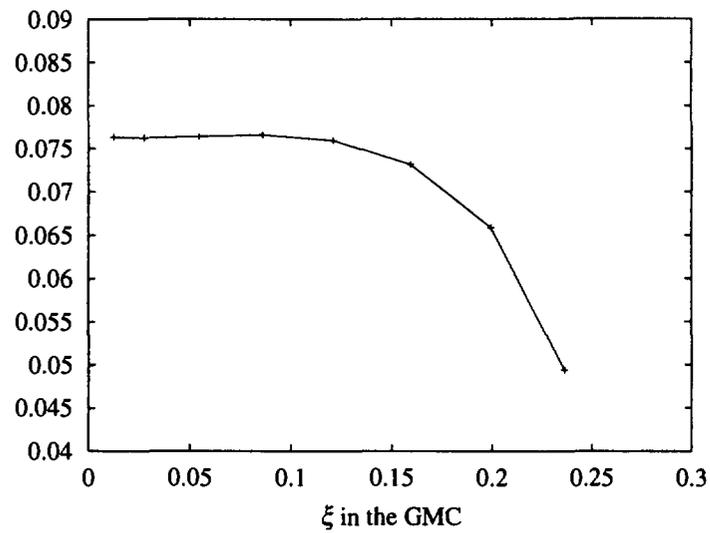


図3. 回転変換.

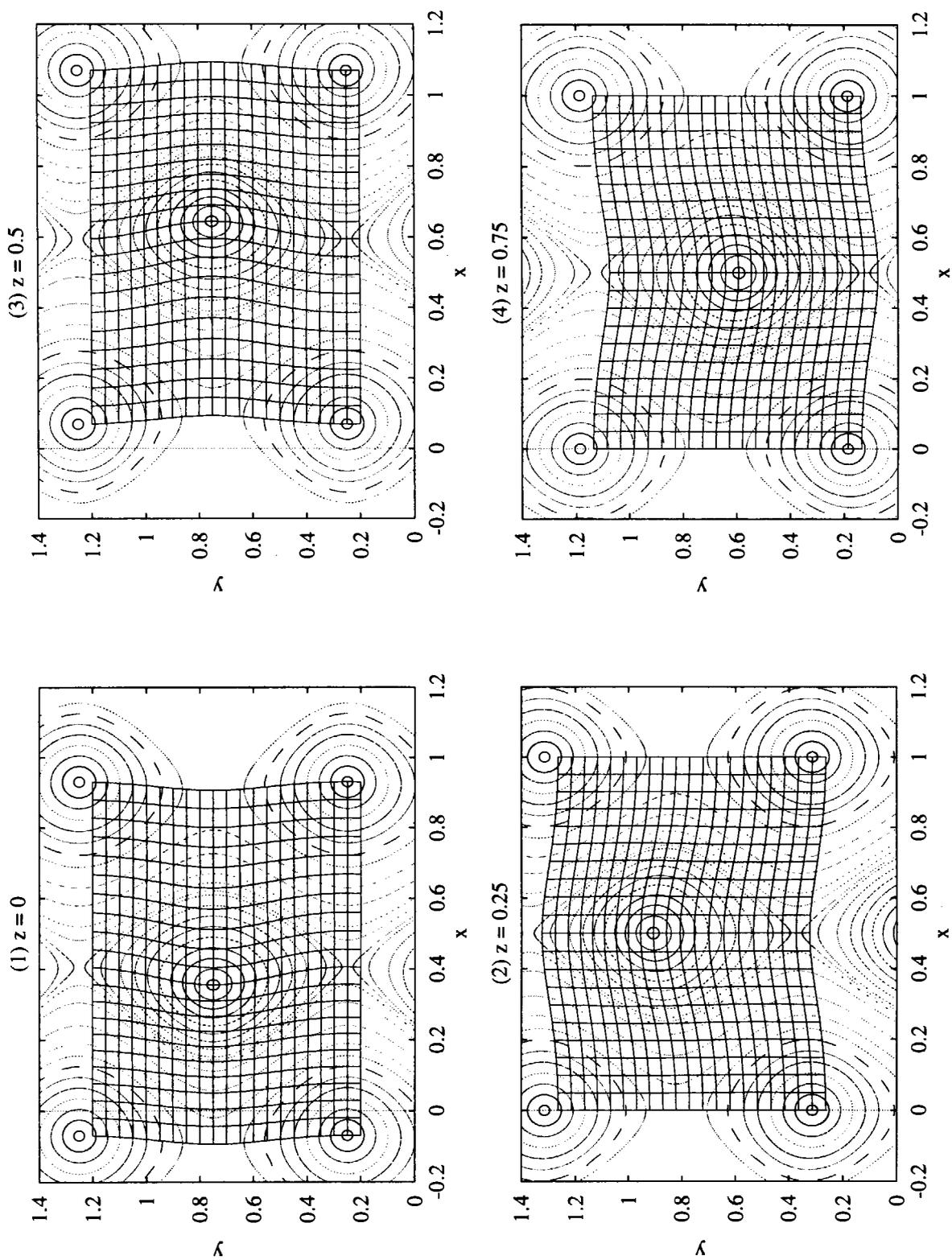
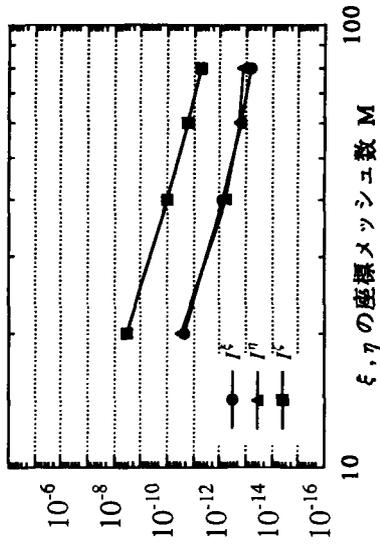


図4. 磁力線のポアンカレ図と「一般磁気座標」の等間隔格子.

(A) 境界部分を含む全座標領域での $\hat{I}^{\xi}, \hat{I}^{\eta}, \hat{I}^{\zeta}$



(B) 境界部分を除いた座標領域での $\hat{I}^{\xi}, \hat{I}^{\eta}, \hat{I}^{\zeta}$

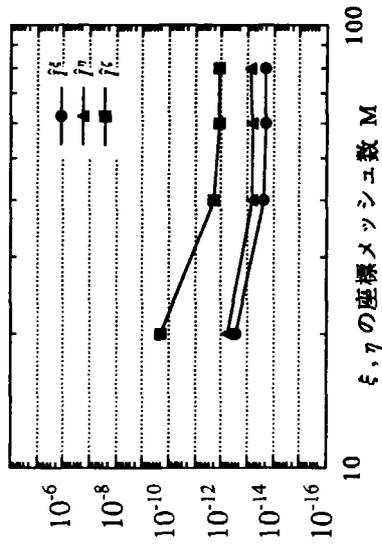
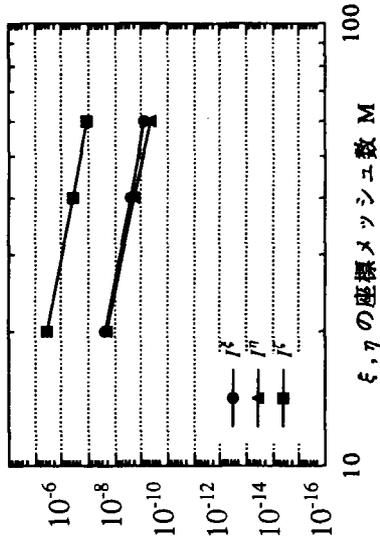


図5. $\hat{I}^{\xi}, \hat{I}^{\eta}, \hat{I}^{\zeta}$ 及び $\hat{I}^{\xi}, \hat{I}^{\eta}, \hat{I}^{\zeta}$
(境界条件: 3階微分=0の場合).

(A) 境界部分を含む全座標領域での $\hat{I}^{\xi}, \hat{I}^{\eta}, \hat{I}^{\zeta}$



(B) 境界部分を除いた座標領域での $\hat{I}^{\xi}, \hat{I}^{\eta}, \hat{I}^{\zeta}$

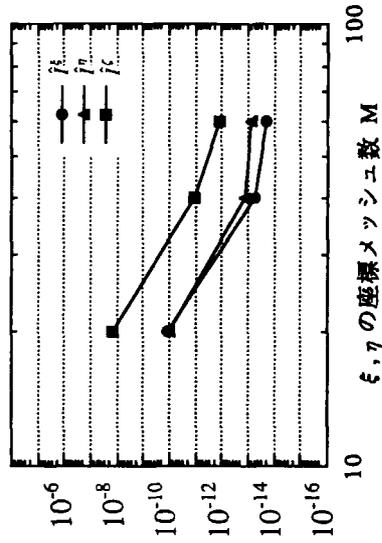


図6. $\hat{I}^{\xi}, \hat{I}^{\eta}, \hat{I}^{\zeta}$ 及び $\hat{I}^{\xi}, \hat{I}^{\eta}, \hat{I}^{\zeta}$
(境界条件: 2階微分=0の場合).

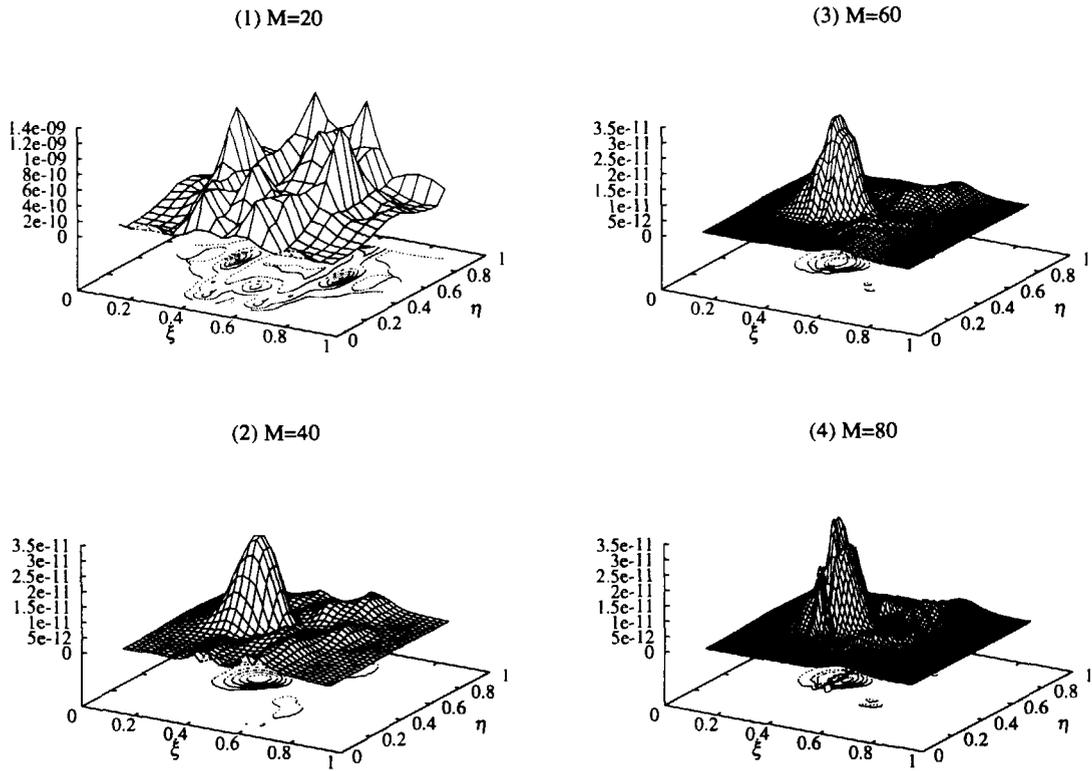


図7. $E_z(\xi, \eta)$ の鳥瞰図.

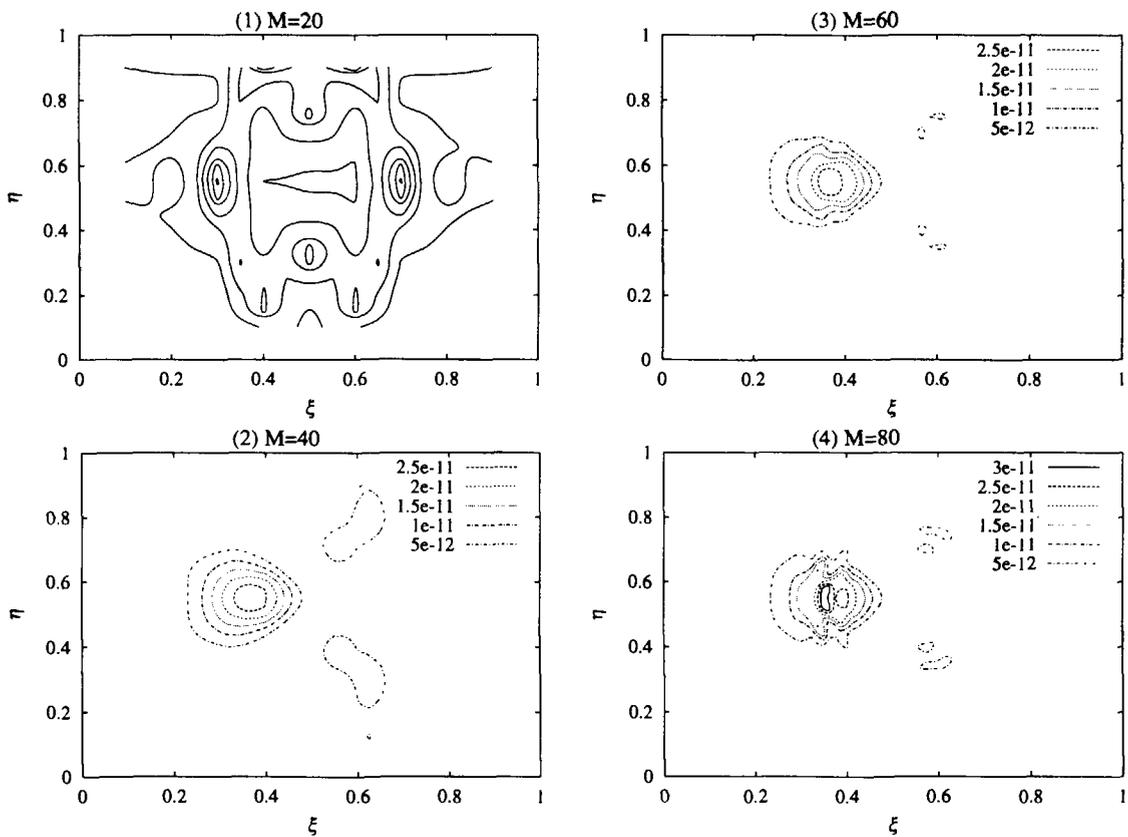


図8. $E_z(\xi, \eta)$ の等高線図.

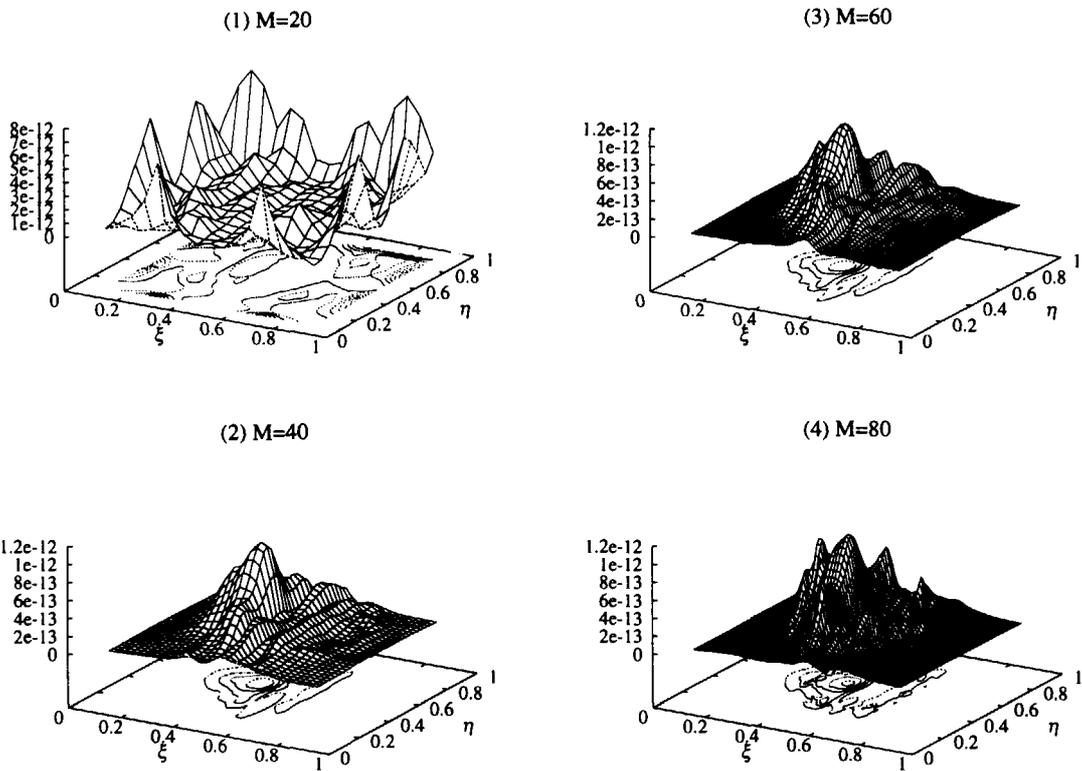


図9. $E_{z\eta}(\xi, \eta)$ の鳥瞰図.

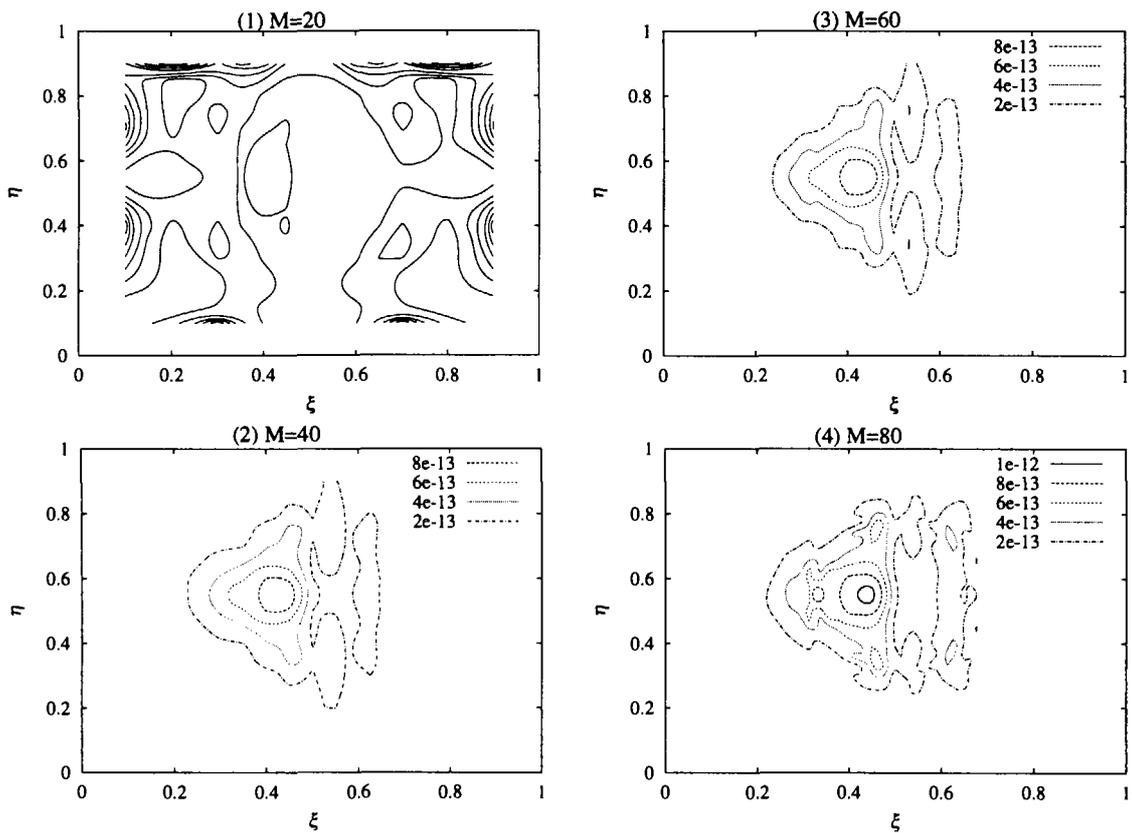


図10. $E_{z\eta}(\xi, \eta)$ の等高線図.

On Numerical Computation of Lyapunov Exponents of Attractors in Free Boundary Problems*

Hitoshi IMAI¹, Toshiki TAKEUCHI¹, Shewli S. SHANTA²
and Naoyuki ISHIMURA³

¹*Faculty of Engineering, The University of Tokushima,*

²*Graduate School of Engineering, The University of Tokushima,*

³*Faculty of Economics, Hitotsubashi University,*

Abstract

In the paper a method for numerical computation of Lyapunov exponents of attractors in free boundary problems is presented. For one-dimensional free boundary problems it facilitates the derivation of ODE systems which are very useful in the concrete analysis. It is applied to a free boundary problem with some parameters. Various attractors are found numerically and their Lyapunov exponents are computed.

Key Words : free boundary, chaos, attractor, spectral method, Lyapunov exponent

1 Introduction

Free boundary problems are boundary value problems defined on domains whose boundaries are unknown and must be determined as the solution. Due to nonlinearity they easily involve chaotic phenomena. Free boundary problems are very important from the practical view point, so investigation of chaotic phenomena is very important.

The investigation is carried out via analysis of bifurcation and attractors. Bifurcation phenomena in a free boundary problem related to natural convection were analyzed numerically[9]. Attractors in free boundary problems were analyzed theoretically[1]. Such attractors are considered in the infinite-dimensional space. It is very difficult to carry out their concrete analysis.

*This work is partially supported by Grant-in-Aid for Scientific Research(Nos. 09440080 and 10354001). This work is also a collaboration with CCSE of Japan Atomic Energy Research Institute.

Attractors of the ODE system is very important. This is because it is useful for concrete analysis[7]. Numerical computation of Lyapunov exponents is easily carried out. If there exist positive Lyapunov exponents, chaotic phenomena exist. However, it is very difficult to derive the ODE system which approximates the PDE system describing a free boundary problem with chaotic phenomena.

In the paper a method for numerical computation of attractors in free boundary problems and their Lyapunov exponents is presented. To see the procedure of the method it is applied to a free boundary problem with some parameters which is of the type of a two-phase Stefan problem. The method consists of SCM(Spectral Collocation Method) and the fixed domain method. For one-dimensional free boundary problems it facilitate the derivation of ODE systems.

2 Test problem

We consider the following one-dimensional free boundary problem with some parameters.

Problem 1. For parameters $|\alpha^\pm|, |\beta|, |s_0| < 1, 0 \leq r \leq 1, q$ and ω^\pm , find $u^\pm(x, t)$ and $s(t)$ such that

$$\begin{aligned} u_t^\pm(x, t) &= u_{xx}^\pm(x, t) + g^\pm(x, t), & 0 < t, \quad 0 < x < s(t), \\ u^\pm(\mp 1, t) &= h^\pm(t), & 0 \leq t, \\ u^\pm(s(t), t) &= 0, & 0 \leq t, \\ u^+(x, 0) &= u^+(x), & -1 < x < s_0, \\ u^-(x, 0) &= u^-(x), & s_0 < x < 1, \\ \frac{d}{dt}s(t) &= -k^+(t)u_x^+(s(t), t) + k^-(t)u_x^-(s(t), t), & 0 < t, \\ s(0) &= s_0 \end{aligned}$$

where

$$\begin{aligned} k^\pm(t) &= r + (1 - r) \frac{1}{2} \frac{1 \pm \beta \sin t}{\pm 1 + \alpha^\pm \sin t} \beta \cos t, \\ h^\pm(t) &= \pm 1 + \alpha^\pm \sin(\omega^\pm t), \\ g^\pm(x, t) &= q \left\{ \pm \frac{(\beta - \alpha^\pm) \cos t}{(1 \pm \beta \sin t)^2} (x - \beta \sin t) \pm \frac{\pm 1 + \alpha^\pm \sin t}{1 \pm \beta \sin t} \beta \cos t \right\}, \\ u^+(x) &= a(x - s_0)^2 + a(s_0 + 1)(x - s_0) - \frac{x - s_0}{s_0 + 1}, \\ u^-(x) &= b(x - s_0)^2 + b(s_0 - 1)(x - s_0) + \frac{x - s_0}{s_0 - 1}. \end{aligned}$$

Parameters a, b should be determined such that $u^+(x) \geq 0, u^-(x) \leq 0$.

Remark. For $a = b = s_0 = r = 0, \omega^\pm = 1$ and $q = 1$, there are exact solutions as follows:

$$\begin{aligned} s(t) &= s_p(t) \equiv \beta \sin t, \\ u^\pm(x, t) &= \frac{\mp h^\pm(t)}{1 \pm s_p(t)} (x - s_p(t)) = \mp \frac{\pm 1 + \alpha^\pm \sin t}{1 \pm \beta \sin t} (x - \beta \sin t). \end{aligned}$$

3 Our method

In analysis of chaotic phenomena attractor plays an very important role. Attractors in free boundary problems were analyzed theoretically[1]. Such attractors are considered in the infinite-dimensional space. It is very difficult to carry out concrete analysis to such attractors.

Attractors of the ODE system is very useful for concrete analysis. However, it is very difficult to derive the ODE system which approximates the PDE system describing a free boundary problem with chaotic phenomena.

In this section a method is presented. It consists of the fixed domain method and the spectral (collocation) method. To see its procedure it is applied to Problem 1.

3.1 Spectral collocation method

The spectral methods are superior in accuracy[3]. In particular, SCM(Spectral Collocation Method) is preferable to nonlinear problems.

In the paper, SCM using Chebyshev Polynomials and Chebyshev-Gauss-Lobatto case's collocation points is used. A function $u(x)$ in $[-1, 1]$ is approximated by the N the order Chebyshev Polynomials as follows:

$$u(x) = \sum_{k=0}^N \tilde{u}_k T_k(x), \quad T_k(x) = \cos(k \arccos x).$$

There is an inversion formula

$$u_j = \sum_{k=0}^N \tilde{u}_k T_k(x_j), \quad \tilde{u}_k = \frac{2}{N\bar{c}_k} \sum_{j=0}^N \frac{1}{\bar{c}_j} u_j T_k(x_j)$$

where

$$\bar{c}_j = \begin{cases} 2, & j = 0, N, \\ 1, & \text{otherwise} \end{cases}, \quad x_j = \cos \frac{j\pi}{N}, \quad j = 0, 1, \dots, N.$$

$\{x_j\}$ is called Chebyshev-Gauss-Lobatto case's collocation points. Derivatives at the collocation points are easily computed from $\{u_j\}$. These mean that it is easy to increase the order of the approximation by increasing the number of collocation points. This feature is quite remarkable and different from other discretization methods. By using this feature we developed IPNS(Infinite-Precision Numerical Simulation) [5, 6]. The application of SCM is similar to that of FDM. So, it is easily applied to the nonlinear system.

3.2 Fixed domain method

SCM can not be applied directly to free boundary problems due to the unknown shape of the domain. To avoid this difficulty, we use the fixed domain method[4, 8, 9]. Mapping functions are introduced for mapping the unknown domain to the fixed rectangular domain.

We use the following variable transformation : $(x, t) \rightarrow (\xi, \tilde{t})$ such that

$$t = t(\tilde{t}) = \tilde{t}, \quad 0 \leq \tilde{t},$$

$$x = x(\xi, \tilde{t}) = \begin{cases} \frac{\tilde{s}(\tilde{t}) + 1}{2}(\xi + 1) - 1, & 0 \leq \tilde{t}, \quad -1 \leq x \leq s(\tilde{t}), \\ \frac{1 - \tilde{s}(\tilde{t})}{2}(\xi - 1) + 1, & 0 \leq \tilde{t}, \quad s(\tilde{t}) \leq x \leq 1. \end{cases}$$

Using these mapping functions, we define

$$\tilde{s}(\tilde{t}) = s(t(\tilde{t})), \quad \tilde{u}^+(\xi, \tilde{t}) = u^+(x(\xi, \tilde{t}), t(\tilde{t})), \quad \tilde{u}^-(\xi, \tilde{t}) = u^-(x(\xi, \tilde{t}), t(\tilde{t})).$$

Then, Problem 1 is transformed in the following fixed boundary problem.

Problem 2. Find $\tilde{u}^\pm(\xi, \tilde{t})$ and $\tilde{s}(\tilde{t})$ such that

$$\begin{aligned} \tilde{u}_\xi^+(\xi, \tilde{t}) &= -k^+(\tilde{t}) \frac{2(\xi+1)}{\{\tilde{s}(\tilde{t})+1\}^2} \tilde{u}_\xi^+(1, \tilde{t}) \tilde{u}_\xi^+(\xi, \tilde{t}) \\ &\quad - k^-(\tilde{t}) \frac{2(\xi+1)}{\{\tilde{s}(\tilde{t})\}^2 - 1} \tilde{u}_\xi^-(1, \tilde{t}) \tilde{u}_\xi^+(\xi, \tilde{t}) + \frac{4}{\{\tilde{s}(\tilde{t})+1\}^2} \tilde{u}_{\xi\xi}^+(\xi, \tilde{t}) \\ &\quad + q \left\{ \frac{(\beta - \alpha^+) \cos \tilde{t}}{(1 + \beta \sin \tilde{t})^2} \left(\frac{\tilde{s}(\tilde{t})+1}{2} (\xi+1) - 1 - \beta \sin \tilde{t} \right) \right. \\ &\quad \left. + \frac{(1 + \alpha^+ \sin \tilde{t}) \beta \cos \tilde{t}}{1 + \beta \sin \tilde{t}} \right\}, \quad 0 < \tilde{t}, \quad -1 < \xi < 1, \\ \tilde{u}^+(-1, \tilde{t}) &= 1 + \alpha^+ \sin(\omega^+ \tilde{t}), \quad 0 \leq \tilde{t}, \\ \tilde{u}^+(1, \tilde{t}) &= 0, \quad 0 \leq \tilde{t}, \\ \tilde{u}^+(\xi, 0) &= \left(\frac{a}{4} (s_0 + 1) (\xi + 1) - \frac{1}{2(s_0 + 1)} \right) (s_0 + 1) (\xi - 1), \quad -1 < \xi < 1, \\ \tilde{u}_\xi^-(\xi, \tilde{t}) &= -k^+(\tilde{t}) \frac{2(\xi-1)}{\{\tilde{s}(\tilde{t})\}^2 - 1} \tilde{u}_\xi^+(1, \tilde{t}) \tilde{u}_\xi^-(\xi, \tilde{t}) \\ &\quad - k^-(\tilde{t}) \frac{2(\xi-1)}{\{\tilde{s}(\tilde{t})-1\}^2} \tilde{u}_\xi^-(1, \tilde{t}) \tilde{u}_\xi^-(\xi, \tilde{t}) + \frac{4}{\{\tilde{s}(\tilde{t})-1\}^2} \tilde{u}_{\xi\xi}^-(\xi, \tilde{t}) \\ &\quad + q \left\{ -\frac{(\beta - \alpha^-) \cos \tilde{t}}{(1 - \beta \sin \tilde{t})^2} \left(\frac{1 - \tilde{s}(\tilde{t})}{2} (\xi - 1) + 1 - \beta \sin \tilde{t} \right) \right. \\ &\quad \left. + \frac{(1 - \alpha^- \sin \tilde{t}) \beta \cos \tilde{t}}{1 - \beta \sin \tilde{t}} \right\}, \quad 0 < \tilde{t}, \quad -1 < \xi < 1, \\ \tilde{u}^-(-1, \tilde{t}) &= 0, \quad 0 \leq \tilde{t}, \\ \tilde{u}^-(1, \tilde{t}) &= -1 + \alpha^- \sin(\omega^- \tilde{t}), \quad 0 \leq \tilde{t}, \\ \tilde{u}^-(\xi, 0) &= \left(\frac{b}{4} (s_0 - 1) (\xi - 1) - \frac{1}{2(s_0 - 1)} \right) (s_0 - 1) (\xi + 1), \quad -1 < \xi < 1, \\ \frac{d}{d\tilde{t}} \tilde{s}(\tilde{t}) &= -k^+(\tilde{t}) \frac{2}{\tilde{s}(\tilde{t})+1} \tilde{u}_\xi^+(1, \tilde{t}) - k^-(\tilde{t}) \frac{2}{\tilde{s}(\tilde{t})-1} \tilde{u}_\xi^-(1, \tilde{t}), \quad 0 < \tilde{t}, \\ \tilde{s}(0) &= s_0. \end{aligned}$$

3.3 ODE system

Numerical computation of attractors can be carried out by the application of SCM in space and time[4] to Problem 2. However, this procedure is not proper for numerical

computation of Lyapunov exponents. The derivation of the ODE system is necessary. The ODE system is very important not only in numerical computation of Lyapunov exponents but also in theoretical analysis. For its derivation SCM not in time but in space is applied.

In the paper the order of the approximation in space N_x is fixed to be 2. Of course, it is very easy to increase N_x . This means original attractors of the PDE system can be approximated arbitrarily by the method. So, the method is very important from the theoretical view point. After the application of SCM in space with $N_x = 2$ the ODE system for parameters $q = 0$, $r = 1$, $\alpha^\pm = \beta = 0.5$ is derived as follows.

Problem 3. Find $u^\pm(t)$ and $s(t)$ such that

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}u^+(t) &= -\frac{1}{8(s(t)+1)^2} (8u^+(t) - \sin(\omega^+t) - 2) (\sin(\omega^+t) + 2) \\ &\quad + \frac{1}{8(s(t)^2 - 1)} (8u^-(t) - \sin(\omega^-t) + 2) (\sin(\omega^+t) + 2) \\ &\quad - \frac{2}{(s(t)+1)^2} (4u^+(t) - \sin(\omega^+t) - 2), \quad t > 0, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}u^-(t) &= -\frac{1}{8(s(t)^2 - 1)} (8u^+(t) - \sin(\omega^+t) - 2) (\sin(\omega^-t) - 2) \\ &\quad - \frac{1}{8(s(t) - 1)^2} (8u^-(t) - \sin(\omega^-t) + 2) (\sin(\omega^-t) - 2) \\ &\quad - \frac{2}{(s(t) - 1)^2} (4u^-(t) - \sin(\omega^-t) + 2), \quad t > 0, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}s(t) &= -\frac{1}{2(s(t)+1)} (8u^+(t) - \sin(\omega^+t) - 2) \\ &\quad - \frac{1}{2(s(t)-1)} (8u^-(t) - \sin(\omega^-t) + 2), \quad t > 0, \end{aligned}$$

$$u^+(0) = u_0^+, \quad u^-(0) = u_0^-, \quad s(0) = s_0.$$

Here $u^+(t)$ and $u^-(t)$ represent $u^+(\frac{s(t)-1}{2}, t)$ and $u^-(\frac{1-s(t)}{2}, t)$, respectively. For the other parameters the derivation of the ODE system is same.

3.4 Transformation into the autonomous system

The ODE system in Problem 3 is not autonomous. So, transformation into the autonomous system is necessary for numerical computation of Lyapunov exponents. It can be done by introducing a new parameter $\theta[2]$. Then, Problem 3 is transformed into the following problem.

Problem 4. Find $u^\pm(t)$, $s(t)$ and $\theta(t)$ such that

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}u^+(t) &= -\frac{1}{8(s(t)+1)^2} (8u^+(t) - \sin(\omega^+\theta(t)) - 2) (\sin(\omega^+\theta(t)) + 2) \\ &\quad + \frac{1}{8(s(t)^2 - 1)} (8u^-(t) - \sin(\omega^-\theta(t)) + 2) (\sin(\omega^+\theta(t)) + 2) \end{aligned}$$

$$-\frac{2}{(s(t)+1)^2} (4u^+(t) - \sin(\omega^+\theta(t)) - 2), \quad t > 0,$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}u^-(t) &= -\frac{1}{8(s(t)^2-1)} (8u^+(t) - \sin(\omega^+\theta(t)) - 2) (\sin(\omega^-\theta(t)) - 2) \\ &\quad -\frac{1}{8(s(t)-1)^2} (8u^-(t) - \sin(\omega^-\theta(t)) + 2) (\sin(\omega^-\theta(t)) - 2) \\ &\quad -\frac{2}{(s(t)-1)^2} (4u^-(t) - \sin(\omega^-\theta(t)) + 2), \quad t > 0, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}s(t) &= -\frac{1}{2(s(t)+1)} (8u^+(t) - \sin(\omega^+\theta(t)) - 2) \\ &\quad -\frac{1}{2(s(t)-1)} (8u^-(t) - \sin(\omega^-\theta(t)) + 2), \quad t > 0, \end{aligned}$$

$$\frac{d}{dt}\theta(t) = 1$$

$$\theta(0) = 0.$$

$$u^+(0) = u_0^+, \quad u^-(0) = u_0^-, \quad s(0) = s_0.$$

4 Numerical results

In this section, numerical results are shown.

Fig. 1 shows numerical results for $q = 1$, $r = 0$, $\alpha^\pm = \beta = 0.5$, $a = b = 0$, $\omega^\pm = 1$. For $s_0 = 0$ exact solutions are known as in Remark and they are periodic. Fig.1 (a) shows numerical solutions are very satisfactory in accuracy. Unfortunately, Fig.1 (b) shows these solutions are not attractors.

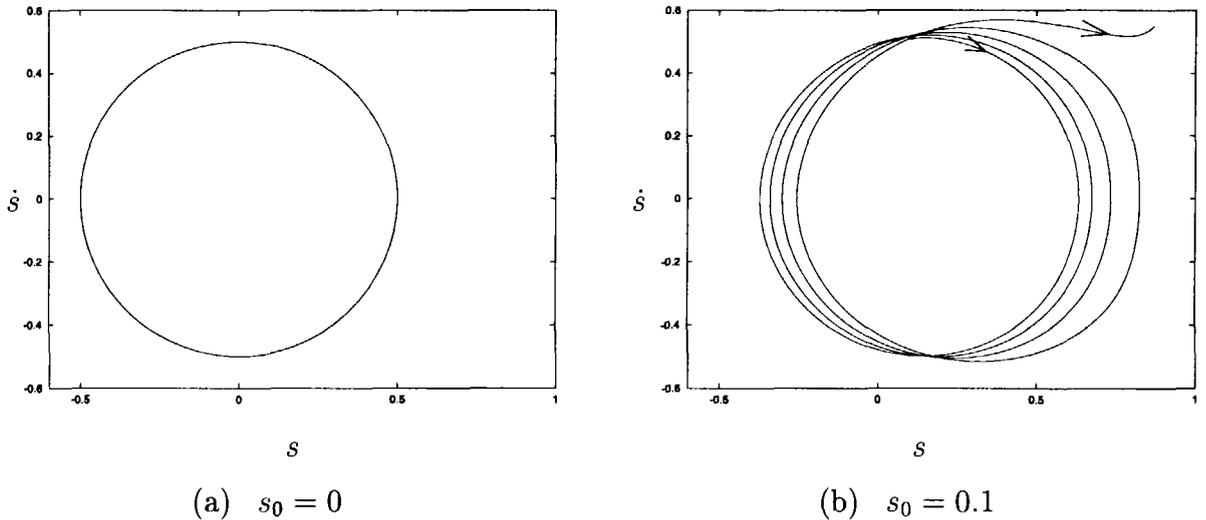


Fig.1. Numerical results in the (s, \dot{s}) plane for $q = 1$, $r = 0$, $\alpha^\pm = \beta = 0.5$, $a = b = 0$, $\omega^\pm = 1$.

Fig.2 shows attractors in the (s, \dot{s}) plane for $q = 1, r = 1, \omega^\pm = 1$. In these cases there are no exact solutions. Numerical solutions converge to the attractors. Fig.2 (a) shows in this case the attractor is a closed curve. This means periodic solutions are stable. Fig.2 (b) shows in this case the attractor is a fixed point. This means the steady state is stable.

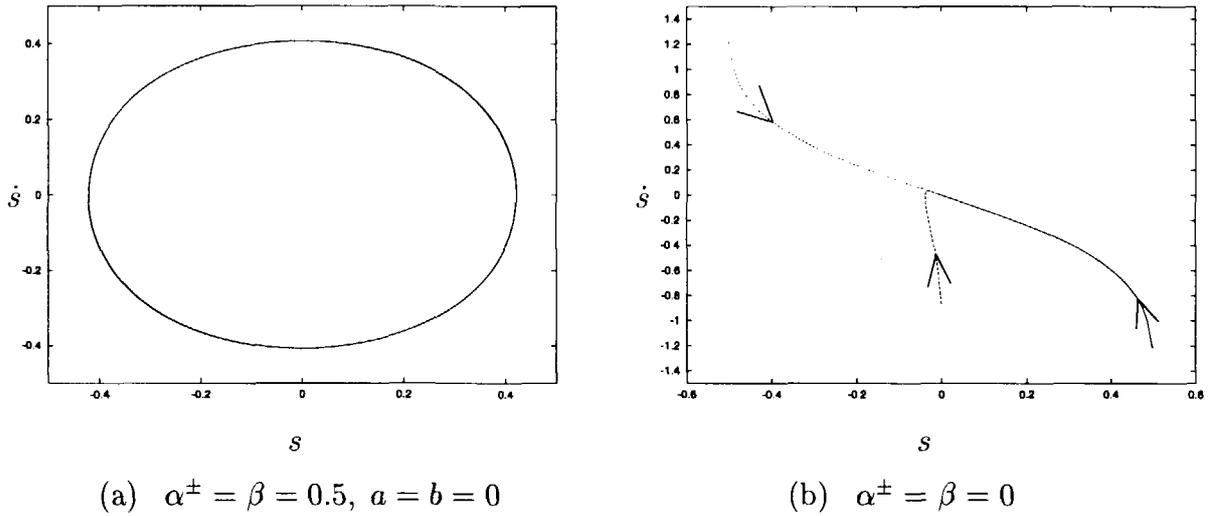


Fig.2. Attractors in the (s, \dot{s}) plane for $q = 1, r = 1, \omega^\pm = 1$.

Fig.3 shows the attractors in the solution space (u^+, u^-, s) . Fig.3 (a) shows the same attractor in Fig.2 (a). Fig.3 (b) shows in this case the attractor is a torus.

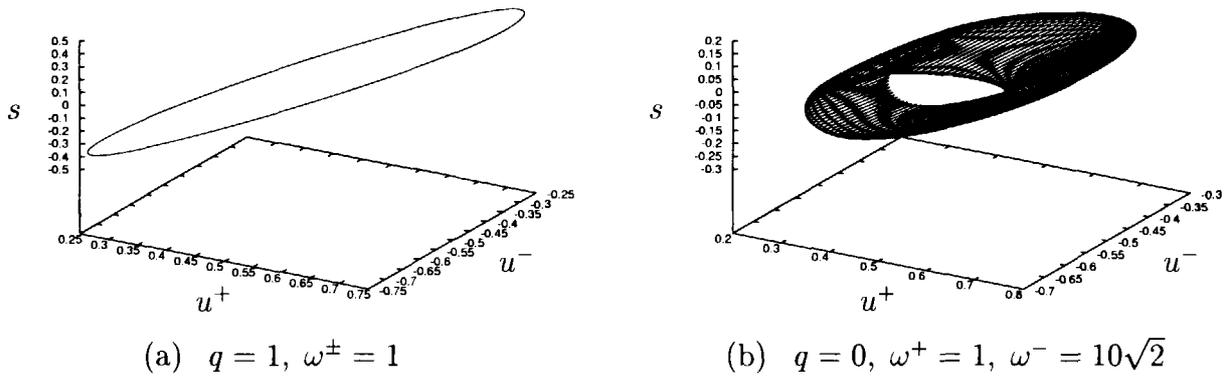


Fig.3. Attractors in the solution space for $r = 1, \alpha^\pm = \beta = 0.5, a = b = 0$.

Figs. 4 and 5 shows attractors and Lyapunov exponents. Attractors are computed from Problem 3. The exponents are computed from both Problem 4 and its linearized problem.

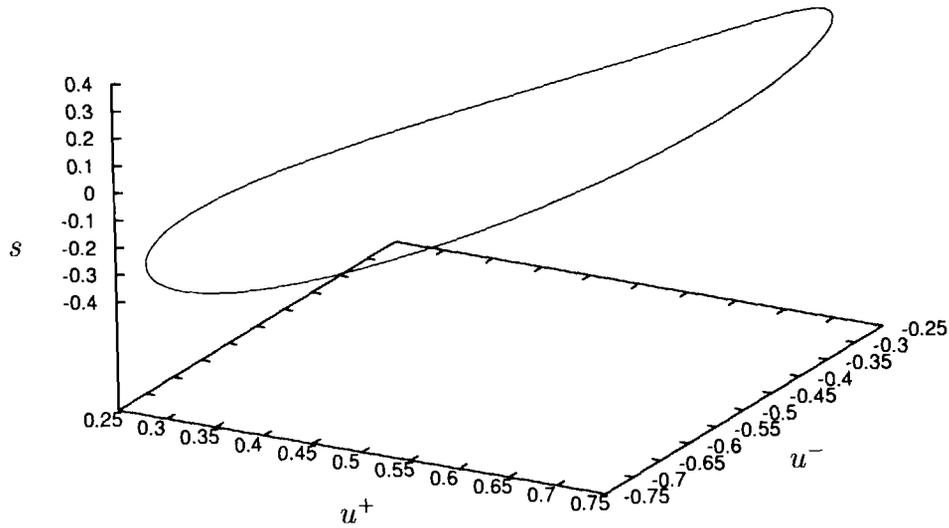


Fig.4. Attractor in the solution space for $q = 0$, $r = 1$, $\alpha^\pm = \beta = 0.5$, $a = b = 0$, $\omega^\pm = 1$.
Lyapunov exponents : $\lambda_1 = -1.360$, $\lambda_2 = -6.712$, $\lambda_3 = -19.13$, $\lambda_4 = 0.000$

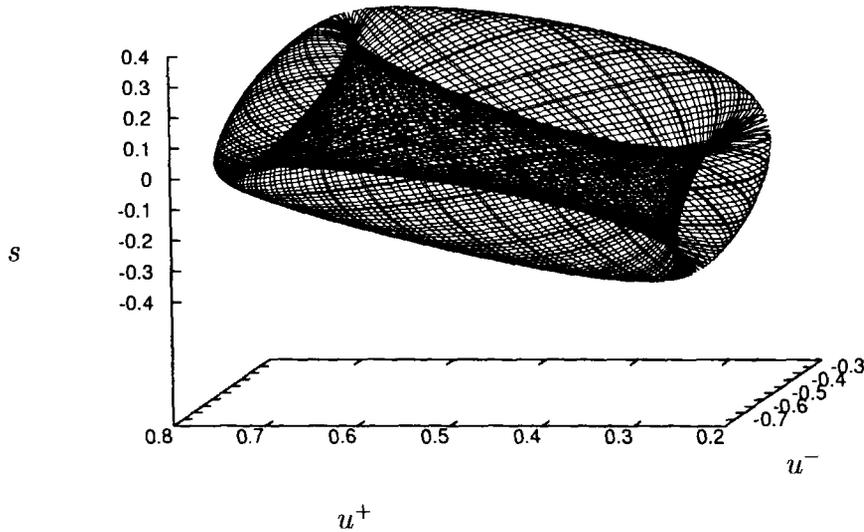


Fig.5. Attractor in the solution space for $q = 0$, $r = 1$, $\alpha^\pm = \beta = 0.5$, $a = b = 0$,
 $\omega^+ = 1$, $\omega^- = \sqrt{2}$. Lyapunov exponents : $\lambda_1 = -1.289$, $\lambda_2 = -7.228$,
 $\lambda_3 = -15.75$, $\lambda_4 = 0.000$

$\lambda_4 = 0.000$ is due to the artificial parameter θ which is introduced in the transformation into the autonomous system.

5 Conclusion

In the paper a method for numerical computation of attractors in free boundary problems and their Lyapunov exponents is presented. The method consists of SCM(Spectral Collocation Method) and the fixed domain method. To see the procedure of the method it is applied to a free boundary problem with some parameters which is of the type of a two-phase Stefan problem. Various attractors are found numerically and their Lyapunov exponents are computed.

For one-dimensional free boundary problems the method facilitate the derivation of ODE systems which approximate PDE system describing free boundary problems. SCM is used in the methos, so original attractors of the PDE system can be approximated arbitrarily. This means the method plays a very important role in theoretical analysis.

References

- [1] T. Aiki, Global Attractors for Two-Phase Stefan Problems in One-Dimensional Space, *Abstract and Applied Analysis*, **2**(1-2), pp.47-66(1997).
- [2] G.L. Baker and J.P. Gollub, *Chaotic Dynamics, an introduction*, Cambridge Univ. Press, 1990.
- [3] C. Canuto, et al., *Spectral Methods in Fluid Dynamics*, Springer-Verlag, New York, 1988.
- [4] H. Imai, Y. Shinohara and T. Miyakoda, Application of Spectral Collocation Methods in Space and Time to Free Boundary Problems, "Hellenic European Research on Mathematic and Informatics '94 (E.A. Lipitakis, ed.)," Hellenic Mathematical Society, **2**, pp.781-786(1994).
- [5] H. Imai et al., On numerical simulation of partial differential equations in arbitrary precision, *RIMS Kokyuroku*, Kyoto University, **1040**, pp.92-99(1998). (in Japanese)
- [6] H. IMAI, T. TAKEUCHI and M. KUSHIDA, On Numerical Simulation of Partial Differential Equations in Infinite Precision, *Advances in Mathematical Sciences and Applications*, **9**(2), pp.1007-1016(1999).
- [7] H. Imai, N. Ishimura and M. Nakamura, Convergence of Attractors for the Simplified Magnetic Bénard Equations, *European Journal of Applied Mathematics*, **7**, pp.53-62(1996).
- [8] Y. Katano, T. Kawamura and H. Takami, Numerical Study of Drop Formation from a Capillary Jet Using a General Coordinate System, "Theoretical and Applied Mechanics," Univ. Tokyo Press, pp.3-14(1986).
- [9] Zhou W., H. Imai and M. Natori, Numerical Study of Convection with a Free Surface by a Spectral Method, *GAKUTO Internat. Ser. Math. Sci. Appl.*, **1**, pp.49-60(1993).