



TECHNISCHE
UNIVERSITÄT
WIEN

DIPLOMARBEIT

Lineare IMEX-Integration zweiter Ordnung für die nichtlineare Landau–Lifshitz–Gilbert-Gleichung

ausgeführt am

Institut für
Analysis und Scientific Computing
TU Wien

unter der Anleitung von

Univ.Prof. Dipl.-Math. Dr.techn. Dirk Praetorius
Dott.mag. Dr.techn. Michele Ruggeri
Dipl.-Ing. Bernhard Erwin Stiftner BSc

durch

Carl-Martin Pfeiler BSc

Matrikelnummer: 01027222

Pernerstorfergasse 42

1100 Wien

Kurzfassung

Zahlreiche technische Innovationen basieren auf mikromagnetischen Vorgängen. Ein prominentes Beispiel sind Lese- und Schreibvorgänge auf klassischen Festplatten. Dort werden Bits als Magnetisierungsmuster in granularen ferromagnetischen Bauteilen codiert.

Die mikromagnetischen Phänomene, welche diese Dynamiken beschreiben, werden unter Annahme einer homogenen Temperaturverteilung im Medium durch die Landau–Lifshitz–Gilbert-Gleichung (LLG) modelliert. Analytische Lösungen dieser hochgradig nichtlinearen partiellen Differentialgleichung mit der nichtkonvexen Nebenbedingung konstanter Magnetisierungslänge sind im Allgemeinen nicht bekannt. Deshalb sind die Entwicklung und die Analysis numerischer Methoden zur approximativen Lösung der LLG-Gleichung von großem Interesse.

In dieser Arbeit betrachten wir Zeitschrittverfahren, welche auf dem Tangent-Plane-Zugang basieren. Integratoren dieser Art verwenden zur örtlichen Diskretisierung Finite-Element-Räume erster Ordnung und eine Predictor-Corrector-Zeitintegration, um die Nebenbedingung zu erhalten.

Die erste explizite Version eines Tangent-Plane-Integrators wurde 2006 vorgeschlagen, und 2008 zu einem unbedingt konvergenten Integrator, welcher den Term höchster Ordnung implizit in der Zeit behandelt, verallgemeinert. Kürzlich wurde in [Alouges et al. (Numer. Math., 128, 2014)] der erste Tangent-Plane-Integrator vorgestellt, welcher formal beinahe zweiter Ordnung exakt in der Zeit ist. Für die verbesserte Konvergenzordnung müssen dort auch Terme niedrigerer Ordnung implizit in der Zeit integriert werden — darunter fällt insbesondere die Streufeld-Approximation der magnetostatischen Maxwell-Gleichungen, deren Berechnung mit hohem Rechenaufwand verbunden ist. Aufgrund der Nichtlokalität des Streufelds ist die zugehörige Finite-Element-Systemmatrix voll besetzt. In der Praxis wird diese Matrix daher nicht assembliert, sondern das lineare Gleichungssystem iterativ gelöst. Wir zeigen in dieser Diplomarbeit, dass nach dem ersten Zeitschritt lineare selbstadjungierte Terme niedrigerer Ordnung durch ein Adams–Bashforth-artiges Zweischrittverfahren explizit in der Zeit integriert werden können. Insbesondere deckt unsere Analysis die Streufeld-Berechnung mittels hybrider FEM-BEM-Methoden ab. Schließlich erhalten wir durch diesen implizit-expliziten (IMEX) Zugang den ersten Tangent-Plane-Integrator, welcher ebenfalls beinahe zweiter Ordnung exakt in der Zeit ist, unbedingt gegen eine schwache Lösung von LLG konvergiert und effizient ist in dem Sinne, dass neben einer Streufeld-Berechnung nur das direkte Lösen eines linearen schwach-besetzten Gleichungssystems pro Zeitschritt nötig ist. Numerische Experimente, ausgeführt mit dem im Zuge dieser Diplomarbeit implementierten LLG-Solver, bestätigen die Ergebnisse unserer Analysis.

Abstract

Numerous technical innovations are based on micromagnetic processes. A popular example are read/write operations on classical hard disk drives. There, bits are encoded as magnetization patterns in granular ferromagnetic components.

The micromagnetic phenomena describing these dynamics are usually modeled by the Landau–Lifshitz–Gilbert (LLG) equation, if we assume a homogeneous temperature distribution in the medium. Analytical solutions to this highly nonlinear partial differential equation with the non-convex constraint of a constant magnetization modulus are in general unknown. Therefore, the development and the analysis of numerical methods for the approximate solution of the LLG equation are of great interest.

In this work, we consider time-marching schemes based on the tangent plane approach. These integrators rely on first-order finite element spaces for the spatial discretization and a predictor-corrector time integration to preserve the modulus constraint.

The first explicit version of a tangent plane integrator was proposed in 2006 and generalized to an unconditionally convergent integrator, which treats the highest-order term implicitly in time, in 2008. Recently, in [Alouges et al. (Numer. Math., 128, 2014)] the first formally almost second-order in time accurate tangent plane integrator was presented. There, for the improved order of convergence lower-order terms have to be integrated implicitly in time — in particular, this includes the stray field approximation of the magnetostatic Maxwell equations, whose evaluation requires high computational effort. Due to the non-locality of the stray field, the corresponding finite element system-matrix is dense. Therefore, in practice rather than assembling this matrix, the linear system is solved iteratively.

In this diploma thesis, we show that after the first time step, by using an Adams–Bashforth-like two-step method, linear self-adjoint terms can be integrated explicitly in time. In particular, our analysis covers the stray field computation by hybrid FEM-BEM methods. Ultimately, by using this implicit-explicit (IMEX) approach we derive the first tangent plane integrator, which is almost second-order accurate in time, converges unconditionally to a weak solution of LLG, and is efficient in the sense that, besides one stray field computation, one only requires the direct solution of one sparse linear system per time step. Numerical experiments, simulated with the LLG solver implemented in the course of this diploma thesis, confirm the results of our analysis.

Danksagung

In erster Linie danke ich Professor Dirk Praetorius für die Möglichkeit meine Diplomarbeit am Institut für Analysis und Scientific Computing als Teil seines Teams zu verfassen. Ihm, Bernhard Stiftner und Michele Ruggeri danke ich für die hervorragende Betreuung dieser Diplomarbeit und das viele Korrekturlesen. Außerdem will ich der gesamten Arbeitsgruppe für die stets unterhaltsame Gestaltung der Arbeitszeit danken.

Ein großes Dankeschön richte ich an Alexander Rieder für das Teilen seines Codes zur Verknüpfung von NGSolve und BEM++, sowie an Alexander Haberl und Markus Faustmann für ihre Hilfe mit BEM++. Ebenso danke ich Matthias Hochsteger, Philip Lederer und Christoph Wintersteiger für den individuellen und von mir oft in Anspruch genommenen NGSolve Support.

Des Weiteren will ich meinen Mitstudenten und Freunden Christoph, Daniel, Gerold, Gregor und Patrick für die unvergessliche Zeit im Studium und abseits der Uni danken. Es darf auch mein guter Freund, ehemaliger Schulkollege und langjähriger Mitbewohner Jan nicht unerwähnt bleiben: Danke für das ausgiebige Feiern und dafür, dass du mich überredet hast nach Wien zu kommen.

Ich danke meiner Freundin Francesca dafür, dass sie durchwegs an mich glaubt und stets für mich da ist. Ich weiß, dass ich immer auf dich zählen kann.

Zu guter Letzt geht ein herzliches Dankeschön an meine Familie nach Innsbruck: Danke euch allen, dass ich mich immer wieder auf den nächsten Heimatbesuch freue. Danke Omi, für deine Unterstützung und unzählige geistreiche Telefonate, die mich zum Glück auch mal von der Mathematik ablenken. Danke Mama und Papa, für eure vollste Unterstützung in jeglicher Hinsicht. Ihr habt dieses erfolgreiche Studium erst möglich gemacht.

Finanziell wurde diese Arbeit durch das WWTF Projekt *Thermally Controlled Magnetization Dynamics* (MA14-44) unterstützt.

Eidesstattliche Erklärung

Ich erkläre an Eides statt, dass ich die vorliegende Diplomarbeit selbstständig und ohne fremde Hilfe verfasst, andere als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel nicht benutzt bzw. die wörtlich oder sinngemäß entnommenen Stellen als solche kenntlich gemacht habe.

Wien, am 21. Dezember 2017

Carl-Martin Pfeiler

Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung und Notation	1
1.1. Notation	4
2. Die Landau–Lifshitz–Gilbert-Gleichung	5
2.1. Schwacher Lösungsbegriff	5
2.2. Lineare Terme niedrigerer Ordnung	6
2.2.1. Anisotropie	6
2.2.2. Das Streufeld	7
3. Diskretisierung	10
3.1. Diskretisierung in der Zeit	10
3.2. Diskretisierung im Ort	11
3.2.1. Notation	11
3.2.2. Standardresultate der FEM	12
3.2.3. Problemspezifische Resultate	14
4. Tangent-Plane-Integratoren	18
4.1. Tangent-Plane-Integrator, explizite Version	19
4.2. Tangent-Plane-Integrator, θ -Schema	23
4.3. Tangent-Plane-Integrator, zweite Ordnung in der Zeit	26
4.3.1. Motivation	27
4.3.2. Konsistenzfehler höherer Ordnung	30
4.3.3. Neue variationelle Formulierung	32
4.3.4. Lösbarkeit des Systems	34
4.3.5. Stabilisierung und CFL-Bedingung	38
4.3.6. Algorithmus	40
4.4. Effizienter Tangent-Plane-Integrator, zweite Ordnung in der Zeit	41
4.4.1. Motivation	41
4.4.2. Explizites Zweischrittverfahren für Terme niedrigerer Ordnung	42
4.4.3. Algorithmus	43
5. Konvergenz	49
5.1. Konvergenzresultat	49
5.2. Konvergenzbeweis	50
5.2.1. Vorbereitung — Diverse Ungleichungen & diskrete Energieabschätzung	51
5.2.2. Beweis von Theorem 5.1(a) — Extrahieren konvergenter Teilfolgen	54
5.2.3. Beweis von Theorem 5.1(b) — Identifizieren der Grenzfunktion	56
5.2.4. Beweis von Theorem 5.1(c) — Energieungleichung der Grenzfunktion	60
5.3. Konvergenzordnung	63

6. Implementierung	65
6.1. Software	65
6.2. Lösen der linearen Gleichungssysteme	65
6.3. Testen der Implementierung — Standardproblem μ MAG #4	67
A. Appendix	74
A.1. Funktionalanalytische Hilfsmittel	74
A.2. Sonstiges	76
Literaturverzeichnis	78

1. Einleitung und Notation

Zahlreiche technische Innovationen basieren auf mikromagnetischen Vorgängen. Ein prominentes Beispiel sind Schreibvorgänge auf klassischen Festplatten. Dort werden Bits als die Magnetisierung in granularen ferromagnetischen Bauteilen codiert.

Die mikromagnetischen Phänomene, welche diese Dynamiken beschreiben, werden durch die Landau–Lifshitz–Gilbert-Gleichung (LLG) modelliert. Für ein beschränktes Lipschitz-Gebiet $\Omega \subset \mathbb{R}^3$, Anfangsdatum $\mathbf{m}^0 \in \mathbf{H}^1(\Omega)$ mit $|\mathbf{m}^0| = 1$ fast überall in Ω , Endzeitpunkt $T > 0$ und den Gilbert-Dämpfungskoeffizienten $\alpha \in (0, 1]$ lautet die Gilbert-Formulierung der LLG-Gleichung

$$\mathbf{m}_t = -\mathbf{m} \times \mathbf{h}_{\text{eff}}(\mathbf{m}) + \alpha \mathbf{m} \times \mathbf{m}_t \quad \text{in } \Omega_T := (0, T) \times \Omega, \quad (1.1a)$$

$$\partial_n \mathbf{m} = \mathbf{0} \quad \text{auf } (0, T) \times \partial\Omega, \quad (1.1b)$$

$$\mathbf{m}(0) = \mathbf{m}^0 \quad \text{auf } \Omega. \quad (1.1c)$$

Das effektive Feld

$$\mathbf{h}_{\text{eff}}(\boldsymbol{\psi}) := -\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \boldsymbol{\psi}} = C_{\text{ex}} \Delta \boldsymbol{\psi} + \boldsymbol{\pi}(\boldsymbol{\psi}) + \mathbf{f},$$

beinhaltet den Austausch-Term $C_{\text{ex}} \Delta \boldsymbol{\psi}$ mit Austausch-Konstante $C_{\text{ex}} := \lambda_{\text{ex}}^2 > 0$, selbst-adjungierte, lineare Terme niedrigerer Ordnung wie zum Beispiel das Streufeld $\mathbf{h}_s(\boldsymbol{\psi})$ oder uniaxiale Anisotropie $(\mathbf{e} \cdot \boldsymbol{\psi})\mathbf{e}$, welche im Operator $\boldsymbol{\pi}(\boldsymbol{\psi})$ zusammengefasst werden, sowie ein konstantes angelegtes externes Feld $\mathbf{f}: \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$. Die Energie \mathcal{E} des Systems ist hier durch

$$\mathcal{E}(\boldsymbol{\psi}) = \frac{C_{\text{ex}}}{2} \|\nabla \boldsymbol{\psi}\|_{L^2(\Omega)}^2 - \frac{1}{2} \langle \boldsymbol{\pi}(\boldsymbol{\psi}), \boldsymbol{\psi} \rangle_{\Omega} - \langle \mathbf{f}, \boldsymbol{\psi} \rangle_{\Omega}$$

gegeben.

Analytische Lösungen der Gleichung (1.1) sind im Allgemeinen nicht bekannt. Deshalb sind die Entwicklung und die Analysis numerischer Methoden zur approximativen Lösung der LLG-Gleichung von großem Interesse.

Um Ansprüche an ein numerisches Verfahren zur Lösung von (1.1) zu motivieren, nehmen wir zunächst die Existenz einer starken Lösung $\mathbf{m} \in \mathbf{C}^2(\Omega_T)$ von (1.1) an. Diese Lösung erfüllt unmittelbar einige grundlegende strukturelle Eigenschaften: Bilden wir das Skalarprodukt von (1.1a) mit \mathbf{m} , so folgt $\mathbf{m}_t \cdot \mathbf{m} = 0$, d.h. die Zeitableitung \mathbf{m}_t steht punktweise in ganz Ω_T orthogonal auf \mathbf{m} . Das impliziert $\partial_t(|\mathbf{m}|^2) = 2\mathbf{m}_t \cdot \mathbf{m} = 0$ und damit die Längenerhaltung $|\mathbf{m}(t, \mathbf{x})| = |\mathbf{m}^0(\mathbf{x})| = 1$ für alle $(t, \mathbf{x}) \in \Omega_T$. Des Weiteren erfüllt das System ein Energiegesetz, das wir im Folgenden herleiten: Zunächst verwenden wir die Vektoridentität

$$\mathbf{a} \times (\mathbf{b} \times \mathbf{c}) = (\mathbf{a} \cdot \mathbf{c})\mathbf{b} - (\mathbf{a} \cdot \mathbf{b})\mathbf{c} \quad \text{für alle } \mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c} \in \mathbb{R}^3$$

und betrachten das Kreuzprodukt von \mathbf{m} mit (1.1)

$$\begin{aligned}\mathbf{m} \times \mathbf{m}_t &= -\mathbf{m} \times (\mathbf{m} \times \mathbf{h}_{\text{eff}}(\mathbf{m})) + \alpha \mathbf{m} \times (\mathbf{m} \times \mathbf{m}_t) \\ &= -(\mathbf{m} \cdot \mathbf{h}_{\text{eff}}(\mathbf{m}))\mathbf{m} + |\mathbf{m}|^2 \mathbf{h}_{\text{eff}}(\mathbf{m}) + \alpha(\mathbf{m} \cdot \mathbf{m}_t)\mathbf{m} - \alpha|\mathbf{m}|^2 \mathbf{m}_t \\ &= -(\mathbf{m} \cdot \mathbf{h}_{\text{eff}}(\mathbf{m}))\mathbf{m} + \mathbf{h}_{\text{eff}}(\mathbf{m}) - \alpha \mathbf{m}_t.\end{aligned}$$

Bilden wir nun das Skalarprodukt dieser Gleichung mit \mathbf{m}_t , dann folgt

$$\mathbf{h}_{\text{eff}}(\mathbf{m}) \cdot \mathbf{m}_t = \alpha |\mathbf{m}_t|^2.$$

Für die Zeitableitung der Energie sehen wir nun

$$\frac{d}{dt} \mathcal{E}(\mathbf{m}(t)) = -\langle \mathbf{h}_{\text{eff}}(\mathbf{m}(t)), \mathbf{m}_t(t) \rangle_{\Omega} = -\alpha \|\mathbf{m}_t(t)\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)}^2 \leq 0,$$

d.h. die Energie des Systems ist monoton fallend in der Zeit. Durch Bilden des Integrals von $t = 0$ bis $t = \tau$ erhalten wir nun das Energiegesetz

$$\mathcal{E}(\mathbf{m}(\tau)) + \int_0^\tau \|\mathbf{m}_t(t)\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)}^2 dt = \mathcal{E}(\mathbf{m}^0) \quad \text{für alle } \tau \in (0, T).$$

Eine Schwierigkeit bei der numerischen Integration stellt die stark nichtlineare Struktur dieser parabolischen Gleichung dar. Des Weiteren sollte ein Integrator die nichtkonvexe Nebenbedingung $|\mathbf{m}| = 1$ sicherstellen. Neben dem intrinsischen Energiegesetz des Systems liegen weitere algorithmische Herausforderungen in der (effizienten) Kopplung mit anderen partiellen Differentialgleichungen, wie zum Beispiel den (magnetostatischen) Maxwell-Gleichungen.

In dieser Arbeit betrachten wir Zeitschrittverfahren, die auf dem Tangent-Plane-Zugang basieren. Integratoren dieser Art verwenden zur örtlichen Diskretisierung Finite-Element-Räume erster Ordnung und sind dadurch auch für komplexere Geometrien geeignet. Wir haben uns bereits überlegt, dass für eine starke Lösung $\mathbf{m} \cdot \mathbf{m}_t = 0$ in Ω_T gilt. Motiviert von dieser Beobachtung besteht die Idee darin, zu gegebenem $t \in [0, T]$ und gegebener Magnetisierung $\mathbf{m}(t, \cdot)$ mit $\mathbf{m}(t, \mathbf{x}) \in \mathbb{S}^2$ für alle $\mathbf{x} \in \Omega$, die Zeitableitung $\mathbf{v}(t, \mathbf{x}) := \partial_t \mathbf{m}(t, \mathbf{x})$ punktweise im Tangentialraum von $\mathbf{m}(t, \mathbf{x}) \in \mathbb{S}^2$ zu suchen. Ins Diskrete wird diese Idee übertragen indem man die Orthogonalität in allen Knoten \mathbf{z}_h einer gegebenen Triangulierung \mathcal{T}_h von Ω fordert, d.h. man fordert $\mathbf{m}_h^n(\mathbf{z}_h) \cdot \mathbf{v}_h^n(\mathbf{z}_h) = 0$ für alle $\mathbf{z}_h \in \mathcal{N}(\mathcal{T}_h)$, wobei \mathbf{m}_h^n respektive \mathbf{v}_h^n diskrete Approximationen an $\mathbf{m}(t, \cdot)$ respektive $\mathbf{v}(t, \cdot)$ bezeichnen. Ein lineares Zeitschrittverfahren der Form $\mathbf{m}_h^{n+1} := \mathbf{m}_h^n + k\mathbf{v}_h^n$, wobei $k > 0$ die diskrete Zeitschrittweite bezeichnet, würde die Nebenbedingung $|\mathbf{m}_h^n(\mathbf{z}_h)| = 1$ nicht erhalten. Um sicherzustellen, dass die Nebenbedingung $|\mathbf{m}_h^n(\mathbf{z}_h)| = 1$ auch für die aktualisierte Magnetisierung \mathbf{m}_h^{n+1} erhalten bleibt, macht man ein lineares Update und projiziert die erhaltene Funktion in allen Knoten \mathbf{z}_h der Triangulierung auf die Sphäre

$$\mathbf{m}_h^{n+1}(\mathbf{z}_h) := \frac{\mathbf{m}_h^n(\mathbf{z}_h) + k\mathbf{v}_h^n(\mathbf{z}_h)}{|\mathbf{m}_h^n(\mathbf{z}_h) + k\mathbf{v}_h^n(\mathbf{z}_h)|} \quad \text{für alle } \mathbf{z}_h \in \mathcal{N}(\mathcal{T}_h). \quad (1.2)$$

Während Tangent-Plane-Integratoren, die als Update (1.2) verwenden, per Konstruktion die Nebenbedingung $|\mathbf{m}| = 1$ sicherstellen, erfüllen sie nicht das Energiegesetz, da das Update (1.2) eine Abnahme der Energie des Systems zur Folge hat [Bar05]. Wir untersuchen Tangent-Plane-Integratoren auf folgende Kriterien:

- unbedingte Konvergenz gegen eine schwache Lösung von (1.1),
- formale Konvergenzordnung in der Zeit,
- effizientes Aufstellen und Lösen des linearen Finite-Element-Gleichungssystems.

Der erste Tangent-Plane-Integrator wurde in [AJ06] präsentiert, dort und in [BKP08] analysiert, und in [Alo08] zu einem θ -Schema zur impliziten zeitlichen Integration des Austausch-Terms erweitert. Die nichtlineare Projektion (1.2) erschwert die Konvergenzanalyse und ist insbesondere der Grund dafür, dass selbst die Crank–Nicolson-artige Wahl $\theta = 1/2$ nur auf ein formal erster Ordnung in der Zeit exaktes Verfahren in der Zeit führt.

In [AKST14] gelang es den Autoren durch eine Modifikation der Gleichung zur Bestimmung der diskreten Zeitableitung \mathbf{v}_h^n einen unbedingt konvergenten Tangent-Plane-Integrator zu formulieren, der formal beinahe zweite Ordnung exakt in der Zeit ist. **Formal** soll betonen, dass die Konvergenz (beinahe) zweiter Ordnung nicht rigoros bewiesen ist: Unter gewissen Regularitätsannahmen kann mit dem Satz von Taylor gezeigt werden, dass durch die Modifikation das Update (1.2) einen kubischen Konsistenzfehler in der Zeitschrittweite liefert. Ebenfalls aufgrund des nichtlinearen Updates (1.2) kann jedoch nicht wie bei der Wärmeleitungsgleichung eine Rekurrenzrelation zum rigorosen Beweis der Konvergenzordnung ausgenutzt werden. Zumindest lässt der bessere Konsistenzfehler jedoch höhere Ordnung erhoffen. Die numerischen Experimente in [AKST14] bestätigen diese Vermutung. Mit **beinahe** zweiter Ordnung drücken wir aus, dass der Fehler des Verfahrens formal mit $\mathcal{O}(k^{2-\varepsilon})$ für alle $\varepsilon > 0$, jedoch nicht mit $\mathcal{O}(k^2)$ fällt. Die Nachteile des Algorithmus aus [AKST14] im Vergleich zu bisherigen Tangent-Plane-Integratoren, beziehungsweise der Preis der für die verbesserte Konvergenzordnung bezahlt wird, ist einerseits eine in der Praxis teurer zu assemblierende Masse-Matrix, die zusätzlich instationär ist; andererseits, dass die Gleichung zur Bestimmung von \mathbf{v}_h^n von $\boldsymbol{\pi}(\mathbf{v}_h^n)$ abhängt. Wenn die Simulation die magnetostatischen Maxwell-Gleichungen berücksichtigt, ist dieser Operator $\boldsymbol{\pi}$ nicht als schwach-besetzte Matrix darstellbar. Somit wird in der Praxis, trotz der Linearität des Gleichungssystems in \mathbf{v}_h^n ein iterativer Löser verwendet. In [DPP⁺17] zeigen wir, wie dieser zweite Nachteil und somit das iterative Lösen vermieden werden kann.

Ausgehend von [AKST14] führen wir in dieser Diplomarbeit eine Modifikation ein, welche die Behandlung von Termen niedrigerer Ordnung durch ein explizites Zweischnittverfahren erlaubt. Inspiriert wurde diese Idee von [PRS17], wo die Autoren für das Midpoint-Verfahren Terme niedrigerer Ordnung mit einem Adams–Bashforth-Zweischnittverfahren explizit in der Zeit behandeln. Schließlich erhalten wir einen Algorithmus, der nur eine Streufeldberechnung pro Zeitschritt, und nur das Lösen eines linearen schwach besetzten Gleichungssystems pro Zeitschritt erfordert. Für unseren effizienten Tangent-Plane-Integrator beweisen wir unbedingte Konvergenz gegen eine schwache Lösung von LLG. Wir zeigen außerdem, dass mit wesentlich geringerem Rechenaufwand dieselbe beinahe quadratische Konvergenz in der Zeit wie für den Integrator aus [AKST14] erwartet werden kann. Um die formale Konvergenzordnung sowie unterschiedliche Laufzeiten experimentell zu untersuchen, wurden alle Tangent-Plane-Integratoren implementiert. Für das Assemblieren der Finite-Element-Matrizen verwenden wir die C++ Bibliothek Netgen/NGSolve [Sch], die Berechnung des Streufelds ist über eine hybride FEM-BEM-Methode und BEM++ [SBA⁺15] realisiert.

1.1. Notation

Wir betrachten stets ein beschränktes Lipschitz-Gebiet $\Omega \subset \mathbb{R}^3$. Für einen Banach-Raum B , definieren wir $\mathbf{B} := B^3$. Zum Beispiel schreiben wir also $\mathbf{C}^\infty(\bar{\Omega}) := (C^\infty(\bar{\Omega}))^3$, $\mathbf{L}^2(\Omega) := (L^2(\Omega))^3$ und $\mathbf{H}^1(\Omega) := (H^1(\Omega))^3$. Für das $\mathbf{L}^2(\Omega)$ -Skalarprodukt schreiben wir

$$\langle \varphi, \psi \rangle_\Omega := \int_\Omega \varphi \cdot \psi \, d\mathbf{x} \quad \text{für alle } \varphi, \psi \in \mathbf{L}^2(\Omega).$$

Wir verwenden dieselbe Notation auch für matrixwertige Funktionen. Wir schreiben also zum Beispiel

$$\langle \nabla \varphi, \nabla \psi \rangle_\Omega := \int_\Omega \nabla \varphi : \nabla \psi \, d\mathbf{x} \quad \text{für alle } \varphi, \psi \in \mathbf{H}^1(\Omega),$$

wobei wir mit $\mathbf{A} : \mathbf{B}$ das innere Frobeniusprodukt zweier Matrizen $\mathbf{A}, \mathbf{B} \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$ bezeichnen. Weiter werden wir folgende Notation verwenden: Wir schreiben $A \lesssim B$, um auszudrücken, dass $A \leq CB$ mit einer generischen Konstante $C > 0$ gilt. Analog verwenden wir $A \gtrsim B$. Wenn wir diese Notation verwenden, geben wir die Abhängigkeiten von $C > 0$ explizit an. Insbesondere hängt die Konstante $C > 0$ nie von sensiblen Parametern, wie zum Beispiel den Diskretisierungsparametern $h, k > 0$ ab. Wir schreiben $A \simeq B$, wenn sowohl $A \lesssim B$ als auch $A \gtrsim B$ gilt.

Weiter verwenden wir die Landau-Symbole \mathcal{O} und Ω . In der Komplexitätstheorie werden diese meist im Zusammenhang mit wachsender Problemgröße $N \rightarrow \infty$ folgendermaßen verwendet: Man schreibt

$$f = \mathcal{O}(g), \quad \text{falls } \limsup_{N \rightarrow \infty} \left| \frac{f(N)}{g(N)} \right| \in \mathbb{R},$$

d.h. $f(N)$ wächst maximal so schnell wie $g(N)$ für $N \rightarrow \infty$. Man schreibt

$$f = \Omega(g), \quad \text{falls } \limsup_{N \rightarrow \infty} \left| \frac{f(N)}{g(N)} \right| \in (\mathbb{R} \cup \{\pm\infty\}) \setminus \{0\},$$

d.h. $f(N)$ wächst mindestens so schnell wie $g(N)$ für $N \rightarrow \infty$.

Unsere Problemgröße entspricht $N \simeq k^{-1}$, wobei $k > 0$ die Zeitschrittweite bezeichnet. Dementsprechend wollen wir dieselbe Notation für $k \rightarrow 0$ verwenden: Wir schreiben $f = \mathcal{O}(g)$, beziehungsweise $f = \Omega(g)$, wenn

$$\limsup_{k \rightarrow 0} \left| \frac{f(k)}{g(k)} \right| \in \mathbb{R} \quad \text{bzw.} \quad \limsup_{k \rightarrow 0} \left| \frac{f(k)}{g(k)} \right| \in (\mathbb{R} \cup \{\pm\infty\}) \setminus \{0\}.$$

2. Die Landau–Lifshitz–Gilbert-Gleichung

Wir betrachten das in Kapitel 1 diskutierte Modellproblem: Für ein beschränktes Lipschitz-Gebiet $\Omega \subset \mathbb{R}^3$, Anfangsdatum $\mathbf{m}^0 \in \mathbf{H}^1(\Omega)$ mit $|\mathbf{m}^0| = 1$ fast überall in Ω , Endzeitpunkt $T > 0$ und den Gilbert-Dämpfungskoeffizienten $\alpha \in (0, 1]$ lautet die Gilbert-Formulierung der LLG-Gleichung

$$\mathbf{m}_t = -\mathbf{m} \times \mathbf{h}_{\text{eff}}(\mathbf{m}) + \alpha \mathbf{m} \times \mathbf{m}_t \quad \text{in } \Omega_T := (0, T) \times \Omega, \quad (2.1a)$$

$$\partial_n \mathbf{m} = \mathbf{0} \quad \text{auf } (0, T) \times \partial\Omega, \quad (2.1b)$$

$$\mathbf{m}(0) = \mathbf{m}^0 \quad \text{auf } \Omega. \quad (2.1c)$$

Das effektive Feld

$$\mathbf{h}_{\text{eff}}(\boldsymbol{\psi}) := -\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \boldsymbol{\psi}} = C_{\text{ex}} \Delta \boldsymbol{\psi} + \boldsymbol{\pi}(\boldsymbol{\psi}) + \mathbf{f}, \quad (2.2)$$

beinhaltet den Austausch-Term $C_{\text{ex}} \Delta \boldsymbol{\psi}$ mit Austausch-Konstante $C_{\text{ex}} := \lambda_{\text{ex}}^2 > 0$, selbst-adjungierte, lineare Terme niedrigerer Ordnung wie zum Beispiel das Streufeld $\mathbf{h}_s(\boldsymbol{\psi})$ oder uniaxiale Anisotropie $(\mathbf{e} \cdot \boldsymbol{\psi})\mathbf{e}$, welche im Operator $\boldsymbol{\pi}(\boldsymbol{\psi})$ zusammengefasst werden, sowie ein konstantes angelegtes externes Feld $\mathbf{f}: \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$. Die Energie \mathcal{E} des Systems ist hier durch

$$\mathcal{E}(\boldsymbol{\psi}) = \frac{C_{\text{ex}}}{2} \|\nabla \boldsymbol{\psi}\|_{L^2(\Omega)}^2 - \frac{1}{2} \langle \boldsymbol{\pi}(\boldsymbol{\psi}), \boldsymbol{\psi} \rangle_{\Omega} - \langle \mathbf{f}, \boldsymbol{\psi} \rangle_{\Omega} \quad (2.3)$$

gegeben. Unter der Nebenbedingung $|\mathbf{m}| = 1$ gilt folgende Äquivalenz.

Lemma 2.1 ([Gol12, Lemma 1.2.1]). *Die Gilbert-Formulierung (2.1a) ist äquivalent zur alternativen Formulierung*

$$\alpha \mathbf{m}_t + \mathbf{m} \times \mathbf{m}_t = \mathbf{h}_{\text{eff}}(\mathbf{m}) - (\mathbf{h}_{\text{eff}}(\mathbf{m}) \cdot \mathbf{m})\mathbf{m} \quad (2.4)$$

unter Hinzunahme der Nebenbedingung $|\mathbf{m}| = 1$ fast überall in Ω_T .

2.1. Schwacher Lösungsbegriff

Wie in der Literatur [AS92] üblich definieren wir den Begriff einer schwachen Lösung von LLG über die Gilbert-Formulierung (2.1).

Definition 2.2 (Schwache Lösung der Gilbert-Form). *Sei $\mathbf{m}^0 \in \mathbf{H}^1(\Omega)$ mit $|\mathbf{m}^0| = 1$ fast überall in Ω . Eine Funktion $\mathbf{m}: \Omega_T \rightarrow \mathbb{R}^3$ nennen wir eine schwache Lösung von (2.1), falls sie die folgenden Bedingungen (i)–(iv) erfüllt:*

(i) $\mathbf{m} \in L^\infty(0, T; \mathbf{H}^1(\Omega)) \cap \mathbf{H}^1(\Omega_T)$ mit $|\mathbf{m}| = 1$ fast überall in Ω_T .

(ii) Für alle $\varphi \in \mathbf{H}^1(\Omega_T)$ gilt

$$\begin{aligned} \int_0^T \langle \partial_t \mathbf{m}(t), \varphi(t) \rangle_\Omega dt &= C_{ex} \int_0^T \langle \mathbf{m}(t) \times \nabla \mathbf{m}(t), \nabla \varphi(t) \rangle_\Omega dt \\ &\quad - \int_0^T \langle \mathbf{m}(t) \times \mathbf{f}(t), \varphi(t) \rangle_\Omega dt - \int_0^T \langle \mathbf{m}(t) \times \boldsymbol{\pi}(\mathbf{m}(t)), \varphi(t) \rangle_\Omega dt \\ &\quad + \alpha \int_0^T \langle \mathbf{m}(t) \times \partial_t \mathbf{m}(t), \varphi(t) \rangle_\Omega dt . \end{aligned} \quad (2.5)$$

(iii) $\mathbf{m}(0) = \mathbf{m}^0$ in $\mathbf{H}^{1/2}(\Omega)$.

(iv) \mathbf{m} erfüllt die Energieungleichung

$$\mathcal{E}(\mathbf{m}(\tau)) + \alpha \int_0^\tau \|\partial_t \mathbf{m}(t)\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)}^2 dt \leq \mathcal{E}(\mathbf{m}^0) \quad (2.6)$$

für fast alle $\tau \in (0, T)$.

2.2. Lineare Terme niedrigerer Ordnung

In diesem Kapitel betrachten wir lineare, selbstadjungierte Terme, d.h. solche, welche die Voraussetzungen an $\boldsymbol{\pi}$ in (2.2) erfüllen. Wenn nicht anders angegeben, folgen wir in diesem Kapitel der Präsentation aus [Rug16, Chapter 2.2.1].

2.2.1. Anisotropie

Durch die mikroskopische Struktur eines ferromagnetischen Materials kann es Achsen geben, nach denen sich die Magnetisierung bevorzugt ausrichtet. So eine bevorzugte Achse $\mathbf{a} \in \mathbb{S}^2$ wird als *leichte Achse* bezeichnet. Mathematisch wird diese Anisotropie des Materials üblicherweise durch eine glatte, nicht-negative Funktion $\phi: \mathbb{S}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ modelliert. Mit einer materialabhängigen Konstante $K > 0$ lautet die zugehörige Energie

$$\mathcal{E}_{\text{ani}}(\boldsymbol{\psi}) := K \int_\Omega \phi(\boldsymbol{\psi}) \, d\mathbf{x} .$$

Im effektiven Feld finden wir diesen Term entsprechend (2.2) als

$$\mathbf{h}_{\text{ani}} = \frac{\partial \mathcal{E}_{\text{ani}}}{\partial \boldsymbol{\psi}} = -K \nabla \phi(\boldsymbol{\psi})$$

wieder.

Zu gegebener leichter Achse $\mathbf{u} \in \mathbb{S}^2$ und Materialkonstante $K_u > 0$ wird uniaxiale Anisotropie beispielsweise durch die Funktion

$$\phi(\boldsymbol{\psi}) := K_u [1 - (\mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\psi})^2]$$

beschrieben. Die Funktion verschwindet genau dann, wenn $\boldsymbol{\psi} = \pm \mathbf{u}$. Der zugehörige Term des effektiven Felds lautet hier

$$\mathbf{h}_{\text{ani}}(\boldsymbol{\psi}) = C_{\text{ani}}(\mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\psi})\mathbf{u}$$

mit $C_{\text{ani}} = 2K_u > 0$. Da $\mathbf{h}_{\text{ani}}(\boldsymbol{\psi})$ im Fall von uniaxialer Anisotropie linear von $\boldsymbol{\psi}$ abhängt, und die Selbstadjungiertheit

$$\langle \mathbf{h}_{\text{ani}}(\boldsymbol{\psi}), \boldsymbol{\varphi} \rangle_{\Omega} = \langle \boldsymbol{\psi}, \mathbf{h}_{\text{ani}}(\boldsymbol{\varphi}) \rangle_{\Omega}$$

erfüllt ist, deckt der Operator $\boldsymbol{\pi}$ aus (2.2) uniaxiale Anisotropie ab.

2.2.2. Das Streufeld

Die Magnetisierung selbst induziert ein magnetisches Feld, welches durch die Maxwell-Gleichungen beschrieben wird. Da die elektromagnetische Wellenlänge viel größer ist als die Dimensionen eines Ferromagnets, kann dieses selbst-induzierte Magnetfeld durch die magnetostatischen Maxwell-Gleichungen beschrieben werden. In der klassischen Theorie des Mikromagnetismus wird die Dynamik in ferromagnetischen Materialien oft ohne elektrische Ströme modelliert. Diese Vereinfachung ist nicht für alle Materialien berechtigt, wenn dem aber so ist, dann können wir die magnetostatische Energie als

$$\mathcal{E}_{\text{stray}}(\mathbf{m}) = -\frac{1}{2} \int_{\Omega} \mathbf{h}_s(\mathbf{m}) \cdot \mathbf{m} \, dx$$

auffassen, wobei $\mathbf{h}_s(\mathbf{m})$ das sogenannte *Streufeld* bezeichnet.

Die Berechnung des Streufelds kann in mikromagnetischen Simulationen oft den Großteil der Rechenzeit in Anspruch nehmen. Verschiedene Strategien zur Beschleunigung dieser Berechnungen wurden vorgeschlagen: In [AKT12], [KVB⁺14] und [AKST14] verwenden die Autoren Approximationsstrategien basierend auf schnellen Summationstechniken wie der *Fast Multipole Method* oder der (nicht-uniformen) *Fast Fourier Transform* aus [KTF⁺08]. Wie in [PRS17] und [DPP⁺17] verwenden wir für unsere Analysis und unsere Implementierung die hybride FEM-BEM-Methode aus [FK90] zur Approximation des Streufelds. In [BFF⁺14] wird dieser Zugang in einem abstraktem Setting analysiert.

Wir halten uns im Text an die anwendungsorientierte Präsentation aus [Gol12, Kapitel 4.3] sowie [PRS17]. Das Streufeld $\mathbf{h}_s \in \mathbf{L}^2(\Omega)$ kann via $\mathbf{h}_s(\mathbf{m}) = -\nabla u|_{\Omega}$ mit dem Gradienten des magnetostatischen Potentials u geschrieben werden. Das magnetostatische Potential $u \in H^1(\mathbb{R}^3)$ löst das Vollraumproblem

$$-\Delta u = -\operatorname{div} \mathbf{m} \quad \text{in } \Omega, \tag{2.7a}$$

$$-\Delta u = 0 \quad \text{in } \mathbb{R}^3 \setminus \overline{\Omega}, \tag{2.7b}$$

$$u^{\text{ext}} - u^{\text{int}} = 0 \quad \text{auf } \partial\Omega, \tag{2.7c}$$

$$(\nabla u^{\text{ext}} - \nabla u^{\text{int}}) \cdot \mathbf{n} = -\mathbf{m} \cdot \mathbf{n} \quad \text{auf } \partial\Omega, \tag{2.7d}$$

$$u(\mathbf{x}) = \mathcal{O}(|\mathbf{x}|^{-1}) \quad \text{für } |\mathbf{x}| \rightarrow \infty. \tag{2.7e}$$

Hier bezeichnet \mathbf{n} den äußeren Normalvektor auf $\partial\Omega$, welcher in Richtung $\mathbb{R}^3 \setminus \bar{\Omega}$ zeigt und u^{ext} die Spur von $u|_{\mathbb{R}^3 \setminus \bar{\Omega}}$ auf $\partial\Omega$, sowie u^{int} die Spur von $u|_{\Omega}$ auf $\partial\Omega$. In [Pra04, Proposition 3.1] wird gezeigt, dass $\mathbf{h}_s: \mathbf{L}^2(\Omega) \rightarrow \mathbf{L}^2(\Omega)$ linear, beschränkt und selbstadjungiert ist, also in unser Setting (2.2) des Operators $\boldsymbol{\pi}$ passt.

Den Ausgangspunkt für die hybride FEM-BEM-Methode zur Approximation des Streufelds stellt die Zerlegung $u = u_1 + u_2$ mit $u_1, u_2 \in H^1(\mathbb{R}^3)$ dar. Das Streufeld kann damit als $\mathbf{h}_s(\mathbf{m}) = -\nabla u|_{\Omega} = -\nabla u_1|_{\Omega} - \nabla u_2|_{\Omega}$ geschrieben werden. Wir setzen u_1 als schwache Lösung von

$$-\Delta u_1 = -\operatorname{div} \mathbf{m} \quad \text{in } \Omega, \quad (2.8a)$$

$$u_1 = 0 \quad \text{in } \mathbb{R}^3 \setminus \bar{\Omega}, \quad (2.8b)$$

$$(\nabla u_1^{\text{ext}} - \nabla u_1^{\text{int}}) \cdot \mathbf{n} = -\mathbf{m} \cdot \mathbf{n} \quad \text{auf } \partial\Omega, \quad (2.8c)$$

an. Nach (2.7)–(2.8) muss u_2 die Bedingungen

$$-\Delta u_2 = 0 \quad \text{in } \mathbb{R}^3 \setminus \partial\Omega, \quad (2.9a)$$

$$u_2^{\text{ext}} - u_2^{\text{int}} = u_1^{\text{int}} \quad \text{auf } \partial\Omega, \quad (2.9b)$$

$$(\nabla u_2^{\text{ext}} - \nabla u_2^{\text{int}}) \cdot \mathbf{n} = 0 \quad \text{auf } \partial\Omega, \quad (2.9c)$$

$$u_2(\mathbf{x}) = \mathcal{O}(|\mathbf{x}|^{-1}) \quad \text{für } |\mathbf{x}| \rightarrow \infty. \quad (2.9d)$$

im schwachen Sinn erfüllen. Für die Darstellung des Streufelds benötigen wir ∇u_1 sowie ∇u_2 nur eingeschränkt auf Ω . Nach dem Ansatz (2.8) ist $u_1|_{\Omega} \in H^1(\Omega)$ die schwache Lösung des Randwertproblems

$$-\Delta(u_1|_{\Omega}) = -\operatorname{div} \mathbf{m} \quad \text{in } \Omega, \quad (2.10a)$$

$$\partial_{\mathbf{n}}(u_1|_{\Omega}) = \mathbf{m} \cdot \mathbf{n} \quad \text{auf } \partial\Omega. \quad (2.10b)$$

Das Transmissionsproblem (2.9) wurde zum Beispiel in [SS11, Section 3] ausführlich behandelt. Nach der Literatur ist $u_2|_{\Omega} \in H^1(\Omega)$ die schwache Lösung des Randwertproblems

$$\Delta u_2|_{\Omega} = 0 \quad \text{in } \Omega, \quad (2.10c)$$

$$u_2|_{\Omega} = (K - 1/2)(u_1|_{\partial\Omega}) \quad \text{auf } \partial\Omega, \quad (2.10d)$$

mit dem zum Laplace-Problem gehörigen Doppelschicht-Integraloperator definiert durch

$$K(u_1|_{\partial\Omega})(\mathbf{x}) := \frac{1}{4\pi} \int_{\partial\Omega} \frac{(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{y})}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|^3} u_1^{\text{int}}(\mathbf{y}) \, dS(\mathbf{y}). \quad (2.11)$$

Eine Approximation an $\mathbf{h}_s(\mathbf{m})$ erhalten wir nun durch Diskretisieren von (2.10). Wir verwenden die Notation $V_h := \mathcal{S}^1(\mathcal{T}_h)$ für eine Triangulierung \mathcal{T}_h von Ω , sowie $\mathbf{V}_h := (V_h)^3$. Um zu gegebener Magnetisierung $\mathbf{m}_h \in \mathbf{V}_h$ eine Approximation $\mathbf{h}_{s,h}(\mathbf{m}_h) \approx \mathbf{h}_s(\mathbf{m})$ zu berechnen, verwenden wir in unserer Analysis sowie in unserer Implementierung folgenden Algorithmus aus [PRS17, Algorithm 12].

Algorithmus 2.3. Input: Approximation $\mathbf{m}_h \in \mathbf{V}_h$ an $\mathbf{m} \in \mathbf{L}^2(\Omega)$.

(i) Berechne $u_{1,h} \in V_h^* := \{v_h \in V_h \mid \int_{\Omega} v_h \, d\mathbf{x} = 0\}$, sodass

$$\langle \nabla u_{1,h}, \nabla v_h \rangle_{\Omega} = \langle \mathbf{m}_h, \nabla v_h \rangle_{\Omega} \quad \text{für alle } v_h \in V_h^* .$$

(ii) Berechne $g_h \in V_h^{\partial\Omega} := \{v_h|_{\partial\Omega} \mid v_h \in V_h\}$, sodass

$$\langle g_h, v_h \rangle_{\partial\Omega} = \langle (K - 1/2)(u_{1,h}|_{\partial\Omega}), v_h \rangle_{\partial\Omega} \quad \text{für alle } v_h \in V_h^{\partial\Omega} .$$

(iii) Berechne $u_{2,h} \in V_h$, sodass $u_{2,h}|_{\partial\Omega} = g_h$ und

$$\langle \nabla u_{2,h}, \nabla v_h \rangle_{\Omega} = 0 \quad \text{für alle } v_h \in V_h^0 := \{v_h \in V_h \mid v_h|_{\partial\Omega} = 0\} .$$

(iv) Definiere $\mathbf{h}_{s,h}(\mathbf{m}_h) := -\nabla u_{1,h} - \nabla u_{2,h} \in \mathbf{L}^2(\Omega)$.

Output: Approximation $\mathbf{h}_{s,h}(\mathbf{m}_h)$ an $\mathbf{h}_s(\mathbf{m})$.

Bemerkung 2.4. (i) Für die Randdaten in Algorithmus 2.3(ii) gilt $(K - 1/2)(u_{1,h}|_{\partial\Omega}) \notin V_h^{\partial\Omega}$. Während die Randdaten in [BFF⁺14] durch eine Scott–Zhang-Projektion diskretisiert werden, verwenden wir, wie in [PRS17] vorgeschlagen, die $L^2(\partial\Omega)$ -Orthogonalprojektion auf $V_h^{\partial\Omega}$ zur Diskretisierung der kontinuierlichen Randdaten $(K - 1/2)(u_{1,h}|_{\partial\Omega})$.

(ii) Für quasi-uniforme Triangulierungen ist die L^2 -Orthogonalprojektion H^1 -stabil und erfüllt eine Approximationseigenschaft erster Ordnung. Nach [Gol12, Lemma 4.3.5] sind diese Eigenschaften hinreichend, sodass [BFF⁺14, Proposition 4.2] gilt.

(iii) [BFF⁺14, Proposition 4.2] stellt sicher, dass die Realisierung des Operators $\mathbf{h}_{s,h}$ durch Algorithmus 2.3 die Voraussetzungen unseres Konvergenzresultats (Satz 5.1) in Kapitel 5 erfüllt.

3. Diskretisierung

In Definition 2.2 haben wir einen schwachen Lösungsbegriff für die Gilbert-Form der Landau–Lifshitz–Gilbert-Gleichung (2.1) eingeführt. Das Finden einer schwachen Lösung gemäß dieser Definition ist ein Problem im unendlich-dimensionalen Raum $\mathbf{H}^1(\Omega_T)$. Um ein numerisches Zeitschrittverfahren anwenden zu können, teilen wir die Zeit- und Ortskomponente der Punkte $\mathbf{X} \in \Omega_T$ in $\mathbf{X} = (t, \mathbf{x}) \in [0, T) \times \Omega = \Omega_T$ auf und fassen Funktionen aus $\mathbf{H}^1(\Omega_T)$ als Abbildungen von $[0, T)$ nach $\mathbf{H}^1(\Omega)$ auf, d.h.

$$\begin{aligned} \mathbf{m}: [0, T) &\rightarrow \mathbf{H}^1(\Omega) \\ t &\mapsto \mathbf{m}(t, \cdot). \end{aligned}$$

Zunächst werden wir in Kapitel 3.1 eine uniforme Diskretisierung des Zeitintervalls $[0, T)$ einführen. Zwischen den diskreten Stützstellen verwenden wir konstante (3.1a) oder affine (3.1b) Interpolation. Dann werden wir in Kapitel 3.2 den unendlich-dimensionalen Raum $\mathbf{H}^1(\Omega)$ durch eine Familie endlich-dimensionaler Finite-Element-Räume $\{\mathbf{V}_h\}_{h>0}$ erster Ordnung approximieren.

3.1. Diskretisierung in der Zeit

Wir zerlegen das Zeitintervall $[0, T)$ uniform in $N \in \mathbb{N}$ Intervalle

$$[0, T) = \bigcup_{n=0}^{N-1} [t_n, t_{n+1}) \quad \text{mit } t_n := n \frac{T}{N} \text{ für } n = 0, 1, \dots, N$$

der Länge $T/N > 0$. Wir nennen $k := T/N$ die (uniforme) Zeitschrittweite. Für einen Banach-Raum \mathbf{B} , eine Folge $(\varphi^n)_{n=-1}^N \subset \mathbf{B}$ und $t \in [t_n, t_{n+1})$ definiere die Interpolationen

$$\varphi_k^-(t) := \varphi^{n-1}, \quad \varphi_k^-(t) := \varphi^n, \quad \varphi_k^+(t) := \varphi^{n+1}, \quad (3.1a)$$

und

$$\varphi_k(t) := \frac{t - t_n}{t_{n+1} - t_n} \varphi^{n+1} + \frac{t_{n+1} - t}{t_{n+1} - t_n} \varphi^n, \quad (3.1b)$$

für $n = 0, 1, \dots, N-1$. Per Definition gilt $\varphi_k^-, \varphi_k^+, \varphi_k \in L^2(0, T; \mathbf{B})$, sowie $\varphi_k \in H^1(0, T; \mathbf{B})$.

3.2. Diskretisierung im Ort

Um den Sobolev-Raum $\mathbf{H}^1(\Omega)$ zu approximieren, verwenden wir konforme Finite-Element-Räume erster Ordnung. Im folgenden Abschnitt 3.2.1 definieren wir die endlich-dimensionalen Räume und fixieren die verwendete Notation. Im daran anschließenden Abschnitt 3.2.2 zitieren wir einige Standardresultate zu Finite-Element-Räumen, beziehungsweise die für unsere Analysis notwendigen Spezialfälle davon. Diese Resultate sind Inhalt jeder einführenden Vorlesung zu Finite-Element-Methoden und können in Standardwerken zu Finite-Element-Methoden wie zum Beispiel [BS08] nachgelesen werden. In Abschnitt 3.2.3 zitieren oder beweisen wir für unsere Problemstellung spezifische Resultate.

3.2.1. Notation

Zunächst definieren wir einige Begriffe aus der Terminologie von Triangulierungen. Wir betrachten ausschließlich aus nicht-degenerierten Tetraedern bestehende, reguläre Triangulierungen \mathcal{T} des Lipschitz-Gebiets Ω .

Definition 3.1. *Eine endliche Zerlegung \mathcal{T} von Ω nennen wir reguläre Triangulierung von Ω , falls*

- $\bar{\Omega} = \bigcup_{T \in \mathcal{T}} T$,
- alle $T \in \mathcal{T}$ kompakte Tetraeder mit $|T| > 0$ sind,
- und der Durchschnitt zweier verschiedener Elemente $T_1, T_2 \in \mathcal{T}$ stets entweder eine gemeinsame Seitenfläche, eine gemeinsame Kante, ein gemeinsamer Knoten oder leer ist.

Zu einer regulären Triangulierung \mathcal{T}_h des beschränkten Lipschitz-Gebiets Ω bezeichne der Diskretisierungsparameter $h > 0$ den maximalen Elementdurchmesser in \mathcal{T}_h , d.h.

$$h := \max_{T \in \mathcal{T}_h} h_T \quad \text{mit } h_T := \text{diam}(T) \text{ für } T \in \mathcal{T}_h.$$

Definition 3.2. *Sei $\gamma > 0$. Eine Familie $\{\mathcal{T}_h\}_{h>0}$ von Triangulierungen nennen wir γ -quasi-uniform, falls für alle $h > 0$ gilt*

$$\gamma^{-1}h \leq |T|^{1/3} \leq \text{diam}(T) \leq h \quad \text{für alle } T \in \mathcal{T}_h.$$

Um später in Kapitel 3.2.3 die Voraussetzungen von Lemma 3.10 zu erfüllen, ist es hinreichend, wenn die Triangulierungen \mathcal{T}_h die folgende Winkelbedingung erfüllen.

Definition 3.3. *Eine Triangulierung \mathcal{T} erfüllt die Winkelbedingung, falls für alle $T \in \mathcal{T}$ der Winkel zwischen je zwei verschiedenen Seitenflächen von T durch $\pi/2$ beschränkt ist.*

Wir wollen den Sobolev-Raum $\mathbf{H}^1(\Omega)$ durch eine Familie endlich-dimensionaler Finite-Element-Räume $\{\mathbf{V}_h\}_{h>0}$ approximieren. Sei dazu $\{\mathcal{T}_h\}_{h>0}$ eine Familie regulärer, γ -quasi-uniformer Triangulierungen von Ω . Bezeichne $\mathcal{S}^1(\mathcal{T}_h)$ den Standard-Finite-Element-Raum erster Ordnung auf \mathcal{T}_h , d.h.

$$\mathcal{S}^1(\mathcal{T}_h) := \{\varphi \in C^0(\Omega) : \varphi|_T \in \mathcal{P}^1(T) \text{ für alle } T \in \mathcal{T}_h\}.$$

Weiter bezeichnen wir mit \mathcal{N}_h die Menge aller Knoten in \mathcal{T}_h , sowie die Menge der Knoten eines Tetraeders $T \in \mathcal{T}_h$ mit $\mathcal{N}(T) := \{z_h \in \mathcal{N}_h \mid z_h \in T\} \subset \mathcal{N}_h$. Es gilt $T = \text{conv}\{z_h : z_h \in \mathcal{N}(T)\}$. Um vektorwertige Funktionen zu approximieren, verwenden wir den endlich-dimensionalen Raum $\mathbf{V}_h := \mathcal{S}^1(\mathcal{T}_h)^3 \subset \mathbf{H}^1(\Omega)$ und definieren den nodalen Interpolanten $\mathcal{I}_h: \mathbf{C}^0(\Omega) \rightarrow \mathbf{V}_h$ durch

$$(\mathcal{I}_h \varphi)(z_h) := \varphi(z_h) \quad \text{für alle } z_h \in \mathcal{N}_h \text{ und für alle } \varphi \in \mathbf{C}^0(\Omega). \quad (3.2)$$

Wir definieren die Menge der zulässigen Magnetisierungen $\mathcal{M}_h \subset \mathbf{V}_h$ als

$$\mathcal{M}_h := \{\psi_h \in \mathbf{V}_h : |\psi_h(z_h)| = 1 \text{ für alle } z_h \in \mathcal{N}_h\} \quad (3.3)$$

und den diskreten Tangentialraum von $\psi_h \in \mathcal{M}_h$ als

$$\mathcal{K}_h(\psi_h) := \{\varphi_h \in \mathbf{V}_h : \psi_h(z_h) \cdot \varphi_h(z_h) = 0 \text{ für alle } z_h \in \mathcal{N}_h\}. \quad (3.4)$$

Zusätzlich benötigen wir noch die Menge

$$\mathcal{U}_h := \{\psi_h \in \mathbf{V}_h : |\psi_h(z_h)| \geq 1 \text{ für alle } z_h \in \mathcal{N}_h\}, \quad (3.5)$$

welche $\psi_h + \varphi_h \in \mathcal{U}_h$ für alle $\psi_h \in \mathcal{M}_h$ und $\varphi_h \in \mathcal{K}_h(\psi_h)$ erfüllt. Diese Beobachtung halten wir im folgenden Lemma fest.

Lemma 3.4. *Sei $\psi_h \in \mathcal{M}_h$ und $\varphi_h \in \mathcal{K}_h(\psi_h)$. Dann gilt $\psi_h + \varphi_h \in \mathcal{U}_h$.*

Beweis. Sei $z_h \in \mathcal{N}_h$ beliebig. Wir zeigen, dass $|\psi_h(z_h) + \varphi_h(z_h)|^2 \geq 1$. Da $\varphi_h \in \mathcal{K}_h(\psi_h)$, gilt

$$|\psi_h(z_h) + \varphi_h(z_h)|^2 = |\psi_h(z_h)|^2 + 2\psi_h(z_h) \cdot \varphi_h(z_h) + |\varphi_h(z_h)|^2 = 1 + |\varphi_h(z_h)|^2 \geq 1.$$

Da $z_h \in \mathcal{N}_h$ beliebig war, folgt die Behauptung. \square

3.2.2. Standardresultate der FEM

In diesem Abschnitt halten wir einige Standardresultate zu Finite-Element-Räumen fest. Wir beginnen mit dem Approximationssatz. Er ist ein zentraler Satz der Finite-Element-Theorie und kann beispielsweise in [BS08, Kapitel 4.4] gefunden werden.

Satz 3.5 (Approximationssatz). *Sei $\{\mathcal{T}_h\}_{h>0}$ eine γ -quasi-uniforme Familie regulärer Triangulierungen von Ω . Sei $3/2 < p \leq \infty$ und $m \in \{0, 1, 2\}$, dann existiert eine Konstante $C > 0$, sodass*

$$|\mathbf{u} - \mathcal{I}_h \mathbf{u}|_{\mathbf{W}^{m,p}(\Omega)} \leq Ch^{2-m} |\mathbf{u}|_{\mathbf{W}^{2,p}(\Omega)} \quad \text{für alle } \mathbf{u} \in \mathbf{W}^{2,p}(\Omega). \quad (3.6)$$

Die Konstante $C > 0$ hängt nur von γ , m und p ab.

Folgendes Lemma ist inklusive Beweis in [Rug16, Lemma 3.4.12] zu finden und beruht auf der Beobachtung, dass $\partial_\alpha(\varphi_h|_T) = \mathbf{0}$ für $|\alpha| \geq 2$, da $\varphi_h|_T$ affin ist für alle $T \in \mathcal{T}_h$, $\varphi_h \in \mathbf{V}_h$.

Lemma 3.6. Sei $\{\mathcal{T}_h\}_{h>0}$ eine Familie regulärer Triangulierungen von Ω . Dann gilt für alle $\varphi_h \in \mathbf{V}_h$ und $\psi \in \mathbf{C}^\infty(\bar{\Omega})$

$$\sum_{T \in \mathcal{T}_h} |\varphi_h \times \psi|_{\mathbf{H}^2(T)}^2 \leq C \|\varphi_h\|_{\mathbf{H}^1(\Omega)}^2 \|\psi\|_{\mathbf{W}^{2,\infty}(\Omega)}^2, \quad (3.7)$$

mit einer generischen Konstante $C > 0$, die insbesondere nicht von h abhängt.

Beweis. Sei $T \in \mathcal{T}_h$ beliebig. Da $\varphi_h|_T$ eine affine Funktion ist, gilt $\partial_\alpha(\varphi_h|_T) = \mathbf{0}$ für alle Multiindizes α mit $|\alpha| \geq 2$. Damit folgt

$$\begin{aligned} |\varphi_h \times \psi|_{\mathbf{H}^2(T)}^2 &= \sum_{|\alpha|=2} \|\partial_\alpha(\varphi_h \times \psi)\|_{\mathbf{L}^2(T)}^2 \simeq \sum_{1 \leq i < j \leq 3} \|\partial_i \partial_j(\varphi_h \times \psi)\|_{\mathbf{L}^2(T)}^2 \\ &= \sum_{1 \leq i < j \leq 3} \|\partial_j \varphi_h \times \partial_i \psi + \partial_i \varphi_h \times \partial_j \psi + \varphi_h \times \partial_i \partial_j \psi\|_{\mathbf{L}^2(T)}^2 \\ &\lesssim \|\varphi_h\|_{\mathbf{H}^1(T)}^2 \|\psi\|_{\mathbf{W}^{2,\infty}(T)}^2. \end{aligned}$$

Durch Summieren über alle Elemente sehen wir

$$\sum_{T \in \mathcal{T}_h} |\varphi_h \times \psi|_{\mathbf{H}^2(T)}^2 \lesssim \|\psi\|_{\mathbf{W}^{2,\infty}(\Omega)}^2 \sum_{T \in \mathcal{T}_h} \|\varphi_h\|_{\mathbf{H}^1(T)}^2 = \|\varphi_h\|_{\mathbf{H}^1(\Omega)}^2 \|\psi\|_{\mathbf{W}^{2,\infty}(\Omega)}^2,$$

was die Behauptung zeigt. \square

Ein weiteres Standardresultat ist die inverse Ungleichung, deren Beweis beispielsweise in [BS08, Kapitel 4.5] nachgelesen werden kann.

Lemma 3.7 (Inverse Ungleichung). Sei $\{\mathcal{T}_h\}_{h>0}$ eine γ -quasi-uniforme Familie regulärer Triangulierungen von Ω . Dann existiert für alle $1 \leq p \leq \infty$ eine Konstante $C > 0$, sodass

$$\|\nabla \varphi_h\|_{\mathbf{L}^p(\Omega)} \leq Ch^{-1} \|\varphi_h\|_{\mathbf{L}^p(\Omega)} \quad \text{für alle } \varphi_h \in \mathbf{V}_h. \quad (3.8)$$

Die Konstante $C > 0$ hängt nur von p und γ ab. \square

Das folgende Resultat besagt, dass die $\|\cdot\|_{\mathbf{L}^p(\Omega)}$ -Norm auf \mathbf{V}_h äquivalent zu einer gewichteten $\|\cdot\|_{\ell^p}$ -Norm auf dem Vektor der Knotenwerte der Funktionen aus \mathbf{V}_h ist und folgt mit einem Skalierungsargument.

Lemma 3.8. Sei $\{\mathcal{T}_h\}_{h>0}$ eine γ -quasi-uniforme Familie regulärer Triangulierungen von Ω . Dann existiert für alle $1 \leq p < \infty$ eine Konstante $C > 0$, sodass

$$C^{-1} \|\varphi_h\|_{\mathbf{L}^p(\Omega)}^p \leq h^3 \sum_{z_h \in \mathcal{N}_h} |\varphi_h(z_h)|^p \leq C \|\varphi_h\|_{\mathbf{L}^p(\Omega)}^p \quad \text{für alle } \varphi_h \in \mathbf{V}_h. \quad (3.9)$$

Die Konstante $C > 0$ hängt nur von p und γ ab. \square

3.2.3. Problemspezifische Resultate

In diesem Abschnitt geben wir einerseits Resultate an, welche speziell für die von uns verwendeten Finite-Element-Räume gelten und nicht Inhalt der Finite-Element-Standardliteratur sind. Andererseits dient der Abschnitt als Zusammenfassung einiger Lemmas, welche sich aus elementarer Rechnung durch das von uns gewählte Zeitschrittverfahren (Algorithmus 4.34 in Kapitel 4) ergeben. Wir geben diese Lemmas hier explizit an, um die Beweisführung in Kapitel 5.2 möglichst übersichtlich und nachvollziehbar gestalten zu können.

Da wir unser Zeitschrittverfahren erst in Kapitel 4 wählen werden, wollen wir in diesem Abschnitt folgende Notation verwenden: Wir fixieren $N \in \mathbb{N}$, sowie die zugehörige Zeitschrittweite $k > 0$ und die Zerlegung des Zeitintervalls $[0, T)$ gemäß Kapitel 3.1. Wir fixieren $h > 0$, sowie eine Triangulierung \mathcal{T}_h von Ω , den zugehörigen Finite-Element-Raum \mathbf{V}_h und die Mengen $\mathcal{M}_h, \mathcal{U}_h \subset \mathbf{H}^1(\Omega)$ gemäß Kapitel 3.2.1. Für jeden Zeitpunkt $t_n = nk \in [0, T]$ mit $n = 0, 1, \dots, N$ bezeichne $\mathbf{m}_h^n \in \mathcal{M}_h$ die zugehörige Magnetisierung. Für alle $n = 0, 1, \dots, N - 1$ sei $\mathbf{v}_h^n \in \mathcal{K}_h(\mathbf{m}_h^n)$ so, dass

$$\mathbf{m}_h^{n+1}(\mathbf{z}_h) = \frac{\mathbf{m}_h^n(\mathbf{z}_h) + k\mathbf{v}_h^n(\mathbf{z}_h)}{|\mathbf{m}_h^n(\mathbf{z}_h) + k\mathbf{v}_h^n(\mathbf{z}_h)|} \quad \text{für alle } \mathbf{z}_h \in \mathcal{N}_h. \quad (3.10)$$

Schließlich sei $\mathbf{m}_{hk}^- \in L^2(0, T; \mathbf{V}_h)$ wie in (3.1a) definiert.

Wir adaptieren das folgende Lemma aus [Rug16, Abschätzung (4.48)].

Lemma 3.9. *Der nodale Interpolant \mathcal{I}_h erfüllt die Approximationseigenschaft*

$$\|\mathbf{m}_{hk}^- \times \boldsymbol{\varphi} - \mathcal{I}_h(\mathbf{m}_{hk}^- \times \boldsymbol{\varphi})\|_{L^2(0, T; \mathbf{H}^1(\Omega))} \leq Ch \|\mathbf{m}_{hk}^-\|_{L^2(0, T; \mathbf{H}^1(\Omega))} \|\boldsymbol{\varphi}\|_{\mathbf{W}^{2, \infty}(\Omega_T)} \quad (3.11)$$

für alle $\boldsymbol{\varphi} \in \mathbf{C}^\infty(\overline{\Omega_T})$. Die Konstante $C > 0$ hängt nur von γ ab.

Beweis. Wir folgen in der Beweisführung [Rug16, Proposition 3.4.3, Lemma 3.4.12, Abschätzung (4.48)] und passen diese auf die hier verwendete $\|\cdot\|_{L^2(0, T; \mathbf{H}^1(\Omega))}$ -Norm an. Die Identitätsabbildung bezeichnen wir mit \mathcal{I} .

Sei $\boldsymbol{\varphi} \in \mathbf{C}^\infty(\overline{\Omega_T})$ beliebig. Sei $t \in [0, T)$ beliebig und $0 \leq n \leq N - 1$ so, dass $t \in [t_n, t_{n+1})$. Dann folgt mit Satz 3.5 und Lemma 3.6, dass

$$\begin{aligned} \|\mathbf{m}_{hk}^-(t) \times \boldsymbol{\varphi}(t) - \mathcal{I}_h(\mathbf{m}_{hk}^-(t) \times \boldsymbol{\varphi}(t))\|_{\mathbf{H}^1(\Omega)}^2 &= \sum_{T \in \mathcal{T}_h} \|(\mathcal{I} - \mathcal{I}_h)(\mathbf{m}_h^n \times \boldsymbol{\varphi}(t))\|_{\mathbf{H}^1(T)}^2 \\ &\stackrel{(3.6)}{\lesssim} h^2 \sum_{T \in \mathcal{T}_h} |\mathbf{m}_h^n \times \boldsymbol{\varphi}(t)|_{\mathbf{H}^2(T)}^2 \\ &\stackrel{(3.7)}{\lesssim} h^2 \|\mathbf{m}_h^n\|_{\mathbf{H}^1(\Omega)}^2 \|\boldsymbol{\varphi}(t)\|_{\mathbf{W}^{2, \infty}(\Omega)}^2 \\ &\leq h^2 \|\mathbf{m}_h^n\|_{\mathbf{H}^1(\Omega)}^2 \|\boldsymbol{\varphi}\|_{\mathbf{W}^{2, \infty}(\Omega_T)}^2. \end{aligned} \quad (3.12)$$

Für den abzuschätzenden Ausdruck gilt nun

$$\begin{aligned}
 \|\mathbf{m}_{hk}^- \times \boldsymbol{\varphi} - \mathcal{I}_h(\mathbf{m}_{hk}^- \times \boldsymbol{\varphi})\|_{L^2(0,T;\mathbf{H}^1(\Omega))}^2 &= \sum_{n=0}^{N-1} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \sum_{T \in \mathcal{T}_h} \|(\mathcal{I} - \mathcal{I}_h)(\mathbf{m}_h^n \times \boldsymbol{\varphi}(t))\|_{\mathbf{H}^1(T)}^2 dt \\
 &\stackrel{(3.12)}{\lesssim} h^2 \|\boldsymbol{\varphi}\|_{\mathbf{W}^{2,\infty}(\Omega_T)}^2 \sum_{n=0}^{N-1} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \|\mathbf{m}_h^n\|_{\mathbf{H}^1(\Omega)}^2 dt \\
 &= h^2 \|\boldsymbol{\varphi}\|_{\mathbf{W}^{2,\infty}(\Omega_T)}^2 \|\mathbf{m}_{hk}^-\|_{L^2(0,T;\mathbf{H}^1(\Omega))}^2.
 \end{aligned}$$

Durch Ziehen der Quadratwurzel folgt nun die Behauptung. \square

Wir zitieren das folgende Resultat aus [Bar05].

Lemma 3.10 ([Bar05, Lemma 3.2]). *Sei $\{\mathcal{T}_h\}_{h>0}$ eine Familie regulärer Triangulierungen von Ω , welche zusätzlich die Winkelbedingung aus Definition 3.3 erfüllen. Dann gilt*

$$\|\nabla \mathcal{I}_h(\boldsymbol{\varphi}_h/|\boldsymbol{\varphi}_h|)\|_{L^2(\Omega)} \leq \|\nabla \boldsymbol{\varphi}_h\|_{L^2(\Omega)} \quad (3.13)$$

für alle $\boldsymbol{\varphi}_h \in \mathcal{U}_h$. \square

Es gilt die folgende elementare Beobachtung.

Lemma 3.11. *Sei $\mathbf{m}_h \in \mathcal{M}_h$. Dann gilt $\|\mathbf{m}_h\|_{L^p(\Omega)} \leq |\Omega|^{1/p}$ für alle $1 \leq p \leq \infty$.*

Beweis. Die Abschätzung folgt direkt aus der Definition von \mathcal{M}_h : Sei $T \in \mathcal{T}_h$ beliebig. Da \mathbf{m}_h eingeschränkt auf $T \in \mathcal{T}_h$ affin ist, nimmt es sein Betragsmaximum in einem der Knoten $\mathbf{z}_h \in \mathcal{N}(T) \subset \mathcal{N}_h$ an. Per Definition von \mathcal{M}_h gilt aber $|\mathbf{m}_h(\mathbf{z}_h)| = 1$ für alle $\mathbf{z}_h \in \mathcal{N}_h$. Damit folgt die Aussage für $p = \infty$. Für $1 \leq p < \infty$ gilt mit obiger Überlegung

$$\|\mathbf{m}_h\|_{L^p(\Omega)}^p = \sum_{T \in \mathcal{T}_h} \|\mathbf{m}_h\|_{L^p(T)}^p \leq \sum_{T \in \mathcal{T}_h} |T| = |\Omega|.$$

Das schließt den Beweis. \square

Eine weitere interessante Beobachtung ist, dass eine Funktion aus \mathbf{V}_h , deren Betrag konstant in Ω ist, selbst konstant in Ω ist.

Lemma 3.12. *Sei $\mathbf{m}_h \in \mathbf{V}_h$ mit $|\mathbf{m}_h| = 1$ in Ω . Dann ist \mathbf{m}_h konstant in Ω .*

Beweis. Seien $T \in \mathcal{T}_h$ sowie $\mathbf{z}_1, \mathbf{z}_2 \in \mathcal{N}(T)$ beliebig und definiere $\mathbf{z}^* := (\mathbf{z}_1 + \mathbf{z}_2)/2 \in T$. Es gilt

$$|\mathbf{m}_h(\mathbf{z}^*)|^2 = \frac{1}{4} |\mathbf{m}_h(\mathbf{z}_1) + \mathbf{m}_h(\mathbf{z}_2)|^2 = \frac{1}{4} (|\mathbf{m}_h(\mathbf{z}_1)|^2 + 2\mathbf{m}_h(\mathbf{z}_1) \cdot \mathbf{m}_h(\mathbf{z}_2) + |\mathbf{m}_h(\mathbf{z}_2)|^2) \leq 1.$$

Also gilt Gleichheit in der Cauchy–Schwarz’schen Ungleichung und folglich $\mathbf{m}_h(\mathbf{z}_1) = \lambda \mathbf{m}_h(\mathbf{z}_2)$ für ein $\lambda \in \mathbb{R}$. Da nach Voraussetzung $|\mathbf{m}_h(\mathbf{z}_1)| = |\mathbf{m}_h(\mathbf{z}_2)| > 0$, folgt $\lambda \in \{+1, -1\}$. Da $\mathbf{m}_h|_T$ affin ist, würde $\lambda = -1$ das Verschwinden $|\mathbf{m}_h(\mathbf{z}^*)| = 0$ implizieren. Das steht im Widerspruch zur Voraussetzung $|\mathbf{m}_h| = 1$ in Ω und es folgt $\lambda = +1$. Das zeigt, dass \mathbf{m}_h elementweise konstant ist. Da Funktionen aus \mathbf{V}_h global stetig sind, folgt, dass \mathbf{m}_h konstant in ganz Ω ist. \square

Die folgenden zwei Lemmas sind essentiell für die Beweisführung in Kapitel 5.2.

Lemma 3.13. *Für alle $0 \leq n \leq N - 1$ gilt*

$$|\mathbf{m}_h^{n+1}(\mathbf{z}_h) - \mathbf{m}_h^n(\mathbf{z}_h) - k\mathbf{v}_h^n(\mathbf{z}_h)| \leq \frac{1}{2}k^2|\mathbf{v}_h^n(\mathbf{z}_h)|^2 \quad \text{für alle } \mathbf{z}_h \in \mathcal{N}_h, \quad (3.14)$$

sowie

$$\|\mathbf{m}_h^{n+1} - \mathbf{m}_h^n - k\mathbf{v}_h^n\|_{\mathbf{L}^{3/2}(\Omega)} \leq Ck^2 \left(\|\mathbf{v}_h^n\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)}^2 + \|\mathbf{v}_h^n\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)} \|\nabla \mathbf{v}_h^n\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)} \right). \quad (3.15)$$

Beweis. Die geometrische Abschätzung (3.14) wird in [Rug16, Lemma 4.3.4] bewiesen. Die zweite Abschätzung (3.15) ist eine Verbesserung der Abschätzung

$$\|\mathbf{m}_h^{n+1} - \mathbf{m}_h^n - k\mathbf{v}_h^n\|_{\mathbf{L}^{4/3}(\Omega)} \leq Ck^2 \|\mathbf{v}_h^n\|_{\mathbf{L}^{8/3}(\Omega)}^2$$

in [Rug16, Corollary 4.3.5] und bedarf einer verfeinerten Analysis und funktionalanalytischer Hilfsmittel.

Zunächst verwenden wir die erste Abschätzung der diskreten Normäquivalenz (3.9) für $p = 3/2$ gefolgt von der geometrischen Abschätzung (3.14) und der zweiten Abschätzung der diskreten Normäquivalenz (3.9) mit $p = 3$. Wir erhalten

$$\begin{aligned} \|\mathbf{m}_h^{n+1} - \mathbf{m}_h^n - k\mathbf{v}_h^n\|_{\mathbf{L}^{3/2}(\Omega)} &\stackrel{(3.9)}{\lesssim} \left(h^3 \sum_{\mathbf{z}_h \in \mathcal{N}_h} |\mathbf{m}_h^{n+1}(\mathbf{z}_h) - \mathbf{m}_h^n(\mathbf{z}_h) - k\mathbf{v}_h^n(\mathbf{z}_h)|^{3/2} \right)^{2/3} \\ &\stackrel{(3.14)}{\lesssim} k^2 \left(h^3 \sum_{\mathbf{z}_h \in \mathcal{N}_h} |\mathbf{v}_h^n(\mathbf{z}_h)|^3 \right)^{2/3} \\ &\stackrel{(3.9)}{\lesssim} k^2 \|\mathbf{v}_h^n\|_{\mathbf{L}^3(\Omega)}^2. \end{aligned} \quad (3.16)$$

Nun erhalten wir aus der Interpolationsungleichung (Lemma A.3) mit $r = 3$, $p = 2$, $q = 6$ und $\theta = 1/2$ die Abschätzung

$$\|\mathbf{v}_h^n\|_{\mathbf{L}^3(\Omega)} \stackrel{(A.2)}{\lesssim} \|\mathbf{v}_h^n\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)}^{1/2} \|\mathbf{v}_h^n\|_{\mathbf{L}^6(\Omega)}^{1/2}. \quad (3.17)$$

Der Sobolev'sche Einbettungssatz (Satz A.4) zeigt weiter

$$\|\mathbf{v}_h^n\|_{\mathbf{L}^6(\Omega)} \lesssim \|\mathbf{v}_h^n\|_{\mathbf{H}^1(\Omega)} \leq \|\mathbf{v}_h^n\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)} + \|\nabla \mathbf{v}_h^n\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)}. \quad (3.18)$$

Aus den Abschätzungen (3.16)–(3.18) folgt nun insgesamt

$$\begin{aligned} \|\mathbf{m}_h^{n+1} - \mathbf{m}_h^n - k\mathbf{v}_h^n\|_{\mathbf{L}^{3/2}(\Omega)} &\stackrel{(3.16)}{\lesssim} k^2 \|\mathbf{v}_h^n\|_{\mathbf{L}^3(\Omega)}^2 \\ &\stackrel{(3.17)}{\lesssim} k^2 \left(\|\mathbf{v}_h^n\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)}^{1/2} \|\mathbf{v}_h^n\|_{\mathbf{L}^6(\Omega)}^{1/2} \right)^2 \\ &\stackrel{(3.18)}{\lesssim} k^2 \|\mathbf{v}_h^n\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)} \left(\|\mathbf{v}_h^n\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)} + \|\nabla \mathbf{v}_h^n\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)} \right). \end{aligned}$$

Das schließt den Beweis. □

Lemma 3.14. Für alle $0 \leq n \leq N - 1$ gilt

$$|\mathbf{m}_h^{n+1}(\mathbf{z}_h) - \mathbf{m}_h^n(\mathbf{z}_h)| \leq k|\mathbf{v}_h^n(\mathbf{z}_h)| \quad \text{für alle } \mathbf{z}_h \in \mathcal{N}_h, \quad (3.19)$$

sowie

$$\|\mathbf{m}_h^{n+1} - \mathbf{m}_h^n\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)} \leq Ck\|\mathbf{v}_h^n\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)}. \quad (3.20)$$

Beweis. Die geometrische Abschätzung (3.19) wird in [Rug16, Lemma 4.3.4] bewiesen. Das Vorgehen um (3.20) zu beweisen, wird im Beweis von [Rug16, Corollary 4.3.5] beschrieben: Wir verwenden die erste Abschätzung der diskreten Normäquivalenz (3.9) für $p = 2$ gefolgt von der geometrischen Abschätzung (3.19) und der zweiten Abschätzung der diskreten Normäquivalenz (3.9) mit $p = 2$. Wir erhalten

$$\begin{aligned} \|\mathbf{m}_h^{n+1} - \mathbf{m}_h^n\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)} &\stackrel{(3.9)}{\lesssim} \left(h^3 \sum_{\mathbf{z}_h \in \mathcal{N}_h} |\mathbf{m}_h^{n+1}(\mathbf{z}_h) - \mathbf{m}_h^n(\mathbf{z}_h)|^2 \right)^{1/2} \\ &\stackrel{(3.19)}{\lesssim} k \left(h^3 \sum_{\mathbf{z}_h \in \mathcal{N}_h} |\mathbf{v}_h^n(\mathbf{z}_h)|^2 \right)^{1/2} \\ &\stackrel{(3.9)}{\lesssim} k\|\mathbf{v}_h^n\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)}. \end{aligned}$$

Das schließt den Beweis. □

In Kapitel 5.2 werden wir die Abschätzungen (3.14) und (3.19) auch in der folgenden Form, welche man durch Division der entsprechenden Abschätzung durch $k > 0$ erhält, benötigen.

Lemma 3.15. Für alle $0 \leq n \leq N - 1$ gilt

$$\left| \frac{\mathbf{m}_h^{n+1}(\mathbf{z}_h) - \mathbf{m}_h^n(\mathbf{z}_h)}{k} \right| \leq |\mathbf{v}_h^n(\mathbf{z}_h)| \quad \text{für alle } \mathbf{z}_h \in \mathcal{N}_h, \quad (3.21)$$

sowie

$$\left| \frac{\mathbf{m}_h^{n+1}(\mathbf{z}_h) - \mathbf{m}_h^n(\mathbf{z}_h)}{k} - \mathbf{v}_h^n(\mathbf{z}_h) \right| \leq \frac{1}{2}k|\mathbf{v}_h^n(\mathbf{z}_h)|^2 \quad \text{für alle } \mathbf{z}_h \in \mathcal{N}_h. \quad (3.22)$$

□

4. Tangent-Plane-Integratoren

In diesem Kapitel geben wir einen Überblick über die verschiedenen Tangent-Plane-Integratoren, die im Laufe der letzten Jahre entwickelt wurden. Der Fokus liegt hierbei auf hinreichenden Voraussetzungen für die Wohldefiniiertheit der Algorithmen; auf Abhängigkeiten (CFL-Bedingungen) der Diskretisierungsparameter, sodass Konvergenzresultate gelten; auf formaler Ordnung der Zeitintegration; sowie auf Recheneffizienz der Integratoren in der Praxis.

Die erste Version eines Tangent-Plane-Integrators wird in [AJ06] präsentiert. Die Autoren beweisen dort Konvergenz des Outputs ihres Integrators gegen eine schwache Lösung von LLG, indem sie zuerst den Grenzübergang $k \rightarrow 0$ und anschließend den Grenzübergang $h \rightarrow 0$ durchführen. In [BKP08] wird die Konvergenzanalyse aus [AJ06] präzisiert, indem die konkrete CFL-Bedingung $k = \mathbf{o}(h^{5/2})$ an die Diskretisierungsparameter formuliert wird, sodass Konvergenz des Outputs gegen eine schwache Lösung von LLG folgt. In [Alo08] wird der Algorithmus aus [AJ06, BKP08] verallgemeinert zu einem θ -Schema zur impliziten Behandlung von Termen höchster Ordnung, wie man es für die lineare Wärmeleitungsgleichung kennt. In Abhängigkeit des Parameters $\theta \in [0, 1]$ werden dort hinreichende CFL-Bedingungen formuliert, sodass Konvergenz gegen eine schwache Lösung von LLG folgt: Insbesondere wird bewiesen, dass der Integrator für die Wahl $1/2 < \theta \leq 1$ unbedingt konvergent ist. Des Weiteren deckt die Analysis für $\theta = 0$ den expliziten Integrator aus [AJ06] ab, und es gelingt die CFL-Bedingung $k = \mathbf{o}(h^{5/2})$ aus [BKP08] weiter abzuschwächen zu $k = \mathbf{o}(h^2)$. Die Anwendbarkeit des θ -Schemas wird in [AKT12] und unabhängig davon in [Gol12] auf allgemeines effektives Feld erweitert. Insbesondere erlaubt die Analysis in [Gol12] im Gegensatz zu jener aus [AKT12] auch die in der Praxis unumgängliche Diskretisierung von π und f . In [AKT12] wird eine Modifikation des θ -Schemas vorgeschlagen, welche durch höhere Ordnung des Konsistenzfehlers Konvergenz zweiter Ordnung in der Zeit erhoffen lässt. In [AKST14] wird diese Idee weiter präzisiert und Konvergenz der berechneten Approximationen gegen eine schwache Lösung von LLG bewiesen. Des Weiteren wird in [AKST14] eine Stabilisierung eingeführt, welche unbedingte Konvergenz des Integrator garantiert.

Diese Diplomarbeit (sowie unsere parallel dazu entstandene Arbeit [DPP⁺17]) modifiziert den Algorithmus aus [AKST14] und zeigt (inspiriert von [PRS17]), dass wir Terme niedrigerer Ordnung im Stil eines Mehrschrittverfahrens explizit in der Zeit behandeln können. Der erhaltene Algorithmus behält alle Vorteile des in [AKST14] präsentierten Integrators gegenüber dem Standard-Tangent-Plane-Integrator aus [Alo08]. Während unser effizienter Tangent-Plane-Integrator ebenso wie der Integrator aus [AKST14] formal beinahe zweite Ordnung in der Zeit liefert, werden beim Integrator aus [AKST14] Terme niedrigerer Ordnung implizit in der Zeit integriert. Unter diese Terme fällt insbesondere die mit hohem

Rechenaufwand verbundene Berechnung der Streufeld-Approximation der magnetostatischen Maxwell-Gleichungen. Die Konsequenz ist eine deutlich geringere Laufzeit unseres effizienten Tangent-Plane-Integrators im Vergleich zum Integrator aus [AKST14], da für unseren Algorithmus auch in der Praxis pro Zeitschritt jeweils nur eine Streufeld-Berechnung durchgeführt werden muss, sowie nur ein lineares schwach-besetztes Gleichungssystem zu lösen ist. Mit der im Zuge dieser Diplomarbeit entstandenen Implementierung all dieser Tangent-Plane-Integratoren führen wir numerische Experimente durch, welche sowohl die verbesserte Laufzeit, als auch die theoretisch mögliche Konvergenz zweiter Ordnung in der Zeit bestätigen. Schließlich zeigen wir in Kapitel 5 unbedingte Konvergenz des Outputs unseres Integrators gegen eine schwache Lösung von LLG.

4.1. Tangent-Plane-Integrator, explizite Version

Ein Problem bei der approximativen Lösung der LLG-Gleichung stellt die Diskretisierung der Nebenbedingung $|\mathbf{m}| = 1$ fast überall in Ω_T dar. Eine Möglichkeit ist das Verwenden von stabilisierenden Straftermen. Diese Strategie war die etablierte Vorgehensweise und wurde von mehreren Autoren analysiert; vgl [AJ06, p. 302]. In [AJ06] wird hingegen ein Algorithmus präsentiert, welcher gänzlich auf Strafterme verzichtet und auf dem sogenannten *Tangent-Plane-Zugang* basiert. Bei dem vorgestellten Algorithmus handelt es sich um ein *Predictor-Corrector*-Schema. Unsere Präsentation orientiert sich an [AJ06].

Der Ausgangspunkt ist die alternative Formulierung

$$\alpha \mathbf{m}_t + \mathbf{m} \times \mathbf{m}_t = \mathbf{h}_{\text{eff}}(\mathbf{m}) - (\mathbf{h}_{\text{eff}}(\mathbf{m}) \cdot \mathbf{m})\mathbf{m} \quad (4.1)$$

der LLG-Gleichung. Diese Formulierung ist unter der Nebenbedingung $|\mathbf{m}| = 1$ äquivalent zur Gilbert-Formulierung, siehe Lemma 2.1. Grundlegend für die Formulierung des Tangent-Plane-Integrators ist die Beobachtung, dass Gleichung (4.1) linear in der Zeitableitung \mathbf{m}_t ist. Man führt die freie Variable $\mathbf{v} := \mathbf{m}_t$ ein und erhält die Gleichung

$$\alpha \mathbf{v} + \mathbf{m} \times \mathbf{v} = \mathbf{h}_{\text{eff}}(\mathbf{m}) - (\mathbf{h}_{\text{eff}}(\mathbf{m}) \cdot \mathbf{m})\mathbf{m}. \quad (4.2)$$

Im Kontinuierlichen lautet die Strategie nun wie folgt: Zu gegebenem $\mathbf{m}(t)$ berechne $\mathbf{v}(t) := \mathbf{m}_t(t)$ aus Gleichung (4.2) und approximiere $\mathbf{m}(t + \Delta t)$ durch eine geeignete Updateformel. Multiplizieren wir Gleichung (4.2) mit einer Testfunktion $\varphi \in \mathbf{H}^1(\Omega)$ so erhalten wir die variationelle Formulierung: Finde $\mathbf{v}(t) \in \mathbf{H}^1(\Omega)$, sodass für alle $\varphi \in \mathbf{H}^1(\Omega)$ gilt

$$\alpha \langle \mathbf{v}(t), \varphi \rangle_\Omega + \langle \mathbf{m}(t) \times \mathbf{v}(t), \varphi \rangle_\Omega = \langle \mathbf{h}_{\text{eff}}(\mathbf{m}(t)), \varphi \rangle_\Omega - \langle (\mathbf{h}_{\text{eff}}(\mathbf{m}(t)) \cdot \mathbf{m}(t))\mathbf{m}(t), \varphi \rangle_\Omega. \quad (4.3)$$

Aus der Nebenbedingung $|\mathbf{m}| = 1$ fast überall in Ω_T folgt unmittelbar $\mathbf{m} \cdot \mathbf{v} = 0$ fast überall in Ω_T . Diese Beobachtung motiviert das Vorgehen für festes t die Lösung $\mathbf{v}(t)$ von (4.2) im Tangentialraum $\mathcal{K}(\mathbf{m}(t)) \subset \mathbf{H}^1(\Omega)$ zu suchen. Als Nächstes überlegen wir uns, dass es sogar ausreichend ist, nur mit Funktionen φ aus dem Tangentialraum $\mathcal{K}(\mathbf{m}(t)) \subset \mathbf{H}^1(\Omega)$ zu testen:

Zunächst rechnen wir nach, dass für Funktionen der Form $\varphi = (\mathbf{m}(t) \cdot \psi)\mathbf{m}(t) \in \mathbf{H}^1(\Omega)$

mit $\boldsymbol{\psi} \in \mathbf{H}^1(\Omega)$ Gleichung (4.3) stets erfüllt ist: Wir verwenden $\mathbf{v}(t) \in \mathcal{K}(\mathbf{m}(t)) \subset \mathbf{H}^1(\Omega)$ und sehen, dass der erste Term auf der linken Seite von Gleichung (4.3) verschwindet

$$\alpha \langle \mathbf{v}(t), \boldsymbol{\varphi} \rangle_\Omega = \alpha \langle \mathbf{v}(t) \cdot \mathbf{m}(t), \mathbf{m}(t) \cdot \boldsymbol{\psi} \rangle_\Omega = 0. \quad (4.4)$$

Lemma A.11 zeigt, dass auch der zweite Term auf der linken Seite von Gleichung (4.3) verschwindet

$$\langle \mathbf{m}(t) \times \mathbf{v}(t), \boldsymbol{\varphi} \rangle_\Omega = \langle (\mathbf{m}(t) \times \mathbf{v}(t)) \cdot \mathbf{m}(t), \mathbf{m}(t) \cdot \boldsymbol{\psi} \rangle_\Omega \stackrel{(A.5)}{=} 0. \quad (4.5)$$

Schließlich zeigt die Nebenbedingung $|\mathbf{m}| = 1$ fast überall in Ω_T , dass auch die rechte Seite von Gleichung (4.3) verschwindet

$$\begin{aligned} & \langle \mathbf{h}_{\text{eff}}(\mathbf{m}(t)) - (\mathbf{h}_{\text{eff}}(\mathbf{m}(t)) \cdot \mathbf{m}(t)) \mathbf{m}(t), \boldsymbol{\varphi} \rangle_\Omega \\ &= \langle (1 - |\mathbf{m}(t)|^2) (\mathbf{h}_{\text{eff}}(\mathbf{m}(t)) \cdot \mathbf{m}(t)), \mathbf{m}(t) \cdot \boldsymbol{\psi} \rangle_\Omega = 0. \end{aligned} \quad (4.6)$$

Wir haben also gezeigt, dass Gleichung (4.3) für Funktionen der Form $\boldsymbol{\varphi} = (\mathbf{m}(t) \cdot \boldsymbol{\psi}) \mathbf{m}(t) \in \mathbf{H}^1(\Omega)$ mit $\boldsymbol{\psi} \in \mathbf{H}^1(\Omega)$ stets erfüllt ist. Nun können wir jede Funktion $\boldsymbol{\psi} \in \mathbf{H}^1(\Omega)$ in ihren zu $\mathbf{m}(t)$ orthogonalen und auf $\text{span}\{\mathbf{m}(t)\}$ projizierten Anteil aufteilen

$$\boldsymbol{\psi} = (\boldsymbol{\psi} - (\mathbf{m}(t) \cdot \boldsymbol{\psi}) \mathbf{m}(t)) + (\mathbf{m}(t) \cdot \boldsymbol{\psi}) \mathbf{m}(t).$$

Da Gleichung (4.3) linear in der Testfunktion $\boldsymbol{\psi} \in \mathbf{H}^1(\Omega)$ ist, folgt aus den Rechnungen (4.4)–(4.6), dass die Gleichung für allgemeines $\boldsymbol{\psi} \in \mathbf{H}^1(\Omega)$ genau dann erfüllt ist, wenn sie für ihren zu $\mathbf{m}(t)$ orthogonalen Anteil $\boldsymbol{\psi} - (\mathbf{m}(t) \cdot \boldsymbol{\psi}) \mathbf{m}(t) \in \mathcal{K}(\mathbf{m}(t))$ erfüllt ist. Folglich reicht es aus Gleichung (4.3) nur mit Funktionen $\boldsymbol{\varphi} \in \mathcal{K}(\mathbf{m}(t))$ zu testen. Dadurch verschwindet letzte Term in (4.3). Zusammenfassend ist also (4.3) äquivalent zu: Finde $\mathbf{v}(t) \in \mathcal{K}(\mathbf{m}(t))$, sodass

$$\alpha \langle \mathbf{v}(t), \boldsymbol{\varphi} \rangle_\Omega + \langle \mathbf{m}(t) \times \mathbf{v}(t), \boldsymbol{\varphi} \rangle_\Omega = \langle \mathbf{h}_{\text{eff}}(\mathbf{m}(t)), \boldsymbol{\varphi} \rangle_\Omega, \quad (4.7)$$

für alle $\boldsymbol{\varphi} \in \mathcal{K}(\mathbf{m}(t))$.

Einsetzen von \mathbf{h}_{eff} , partielle Integration für den Laplace-Term und Ausnutzen der Randbedingung (2.1b) führt schließlich für gegebenes $\mathbf{m}(t) \in \mathbf{H}^1(\Omega)$ auf: Finde $\mathbf{v}(t) \in \mathcal{K}(\mathbf{m}(t))$, sodass

$$\alpha \langle \mathbf{v}(t), \boldsymbol{\varphi} \rangle_\Omega + \langle \mathbf{m}(t) \times \mathbf{v}(t), \boldsymbol{\varphi} \rangle_\Omega = -C_{\text{ex}} \langle \nabla \mathbf{m}(t), \nabla \boldsymbol{\varphi} \rangle_\Omega + \langle \boldsymbol{\pi}(\mathbf{m}(t)), \boldsymbol{\varphi} \rangle_\Omega + \langle \mathbf{f}, \boldsymbol{\varphi} \rangle_\Omega, \quad (4.8)$$

für alle $\boldsymbol{\varphi} \in \mathcal{K}(\mathbf{m}(t))$.

Um ein numerisches Verfahren zu erhalten, wollen wir die kontinuierliche Gleichung (4.8) mittels Finite-Element-Diskretisierung in ein lineares Gleichungssystem umformulieren. Wir verwenden die in Kapitel 3.2.1 eingeführte Notation sowie den Raum $\mathbf{V}_h := \mathcal{S}^1(\mathcal{T})^3 \subset \mathbf{H}^1(\Omega)$. Die Nebenbedingung $|\mathbf{m}| = 1$ fast überall in Ω können wir nicht direkt in den diskreten Raum übernehmen, da $|\mathbf{m}_h| = 1$ für $\mathbf{m}_h \in \mathbf{V}_h$ impliziert, dass \mathbf{m}_h konstant ist, siehe Lemma 3.12. Stattdessen fordern wir für diskrete Approximationen $\mathbf{m}_h \in \mathbf{V}_h$ an die kontinuierliche Magnetisierung \mathbf{m} , dass $|\mathbf{m}_h(\mathbf{z}_h)| = 1$ für alle $\mathbf{z}_h \in \mathcal{N}_h$. Diese Bedingung entspricht genau $\mathbf{m}_h \in \mathcal{M}_h$. Entsprechend betrachten wir $\mathbf{v}_h \in \mathcal{K}_h(\mathbf{m}_h)$ anstelle von

$\mathbf{v} \in \mathcal{K}(\mathbf{m})$. Weiter seien $\pi_h : \mathbf{V}_h \rightarrow \mathbf{V}_h$ eine Approximation an $\pi : \mathbf{H}^1(\Omega) \rightarrow \mathbf{H}^1(\Omega)$, sowie $\mathbf{f}_h \in \mathbf{V}_h$ eine Approximation an $\mathbf{f} \in \mathbf{L}^2(\Omega)$, deren Eigenschaften wir an dieser Stelle nicht weiter präzisieren. Für die geforderten Eigenschaften bezüglich Algorithmus 4.34, welcher den Kern dieser Arbeit darstellt, siehe Theorem 5.1. Die diskretisierte Version der variationellen Formulierung (4.8) lautet nun:

Zu gegebenem $\mathbf{m}_h \in \mathcal{M}_h$ finde $\mathbf{v}_h \in \mathcal{K}_h(\mathbf{m}_h)$, sodass:

$$\alpha \langle \mathbf{v}_h, \boldsymbol{\varphi}_h \rangle_\Omega + \langle \mathbf{m}_h \times \mathbf{v}_h, \boldsymbol{\varphi}_h \rangle_\Omega = -C_{\text{ex}} \langle \nabla \mathbf{m}_h, \nabla \boldsymbol{\varphi}_h \rangle_\Omega + \langle \pi_h(\mathbf{m}_h), \boldsymbol{\varphi}_h \rangle_\Omega + \langle \mathbf{f}_h, \boldsymbol{\varphi}_h \rangle_\Omega, \quad (4.9)$$

für alle $\boldsymbol{\varphi}_h \in \mathcal{K}_h(\mathbf{m}_h)$.

Um ein volldiskretes Verfahren zu erhalten, müssen wir noch eine Zeitdiskretisierung, sowie eine Updateformel definieren. Sei dazu $N \in \mathbb{N}_{>0}$ gegeben. Definiere $k := T/N$ und eine uniforme, disjunkte Zerlegung von $(0, T]$ in N Intervalle $(t_n, t_{n+1}]$ mit $t_n := nk$ für $n = 0, 1, \dots, N$. Für eine gegebene Approximation $\mathbf{m}_h^n \in \mathcal{M}_h$ an $\mathbf{m}(t_n)$ könnte man nun (4.9) lösen um \mathbf{v}_h^n zu erhalten und \mathbf{m}_h^{n+1} durch die lineare Extrapolation

$$\mathbf{m}_h^{n+1} := \mathbf{m}_h^n + k\mathbf{v}_h^n \quad (4.10)$$

definieren. Diese Wahl der Updateformel wird in der Literatur als *Projection-free tangent plane scheme* bezeichnet und in [AHP⁺14, Rug16] analysiert. Man beachte, dass bei Verwendung der Updateformel (4.10) im nicht-trivialen Fall $\mathbf{v}_h^n \neq \mathbf{0}$ stets $\mathbf{m}_h^{n+1} \notin \mathcal{M}_h$ gilt. Wir betrachten hingegen die Update Formel

$$\mathbf{m}_h^{n+1}(\mathbf{z}_h) := \frac{\mathbf{m}_h^n(\mathbf{z}_h) + k\mathbf{v}_h^n(\mathbf{z}_h)}{|\mathbf{m}_h^n(\mathbf{z}_h) + k\mathbf{v}_h^n(\mathbf{z}_h)|} \quad \text{für alle } \mathbf{z}_h \in \mathcal{N}_h. \quad (4.11)$$

Per Definition des Updates (4.11) gilt stets $\mathbf{m}_h^{n+1} \in \mathcal{M}_h$. Kombinieren von (4.9) und (4.11) liefert das folgende volldiskrete numerische Verfahren.

Algorithmus 4.1 (Tangent-Plane-Integrator, explizit; [AJ06, BKP08]). *Input:* Approximation $\mathbf{m}_h^0 \in \mathcal{M}_h$ an die Anfangsmagnetisierung \mathbf{m}^0 , Zeitschrittweite $k = T/N > 0$ mit $N \in \mathbb{N}$.

Loop: Für $n = 0, 1, \dots, N-1$ iteriere die folgenden Schritte (a)–(b):

(a) Berechne $\mathbf{v}_h^n \in \mathcal{K}_h(\mathbf{m}_h^n)$, sodass für alle $\boldsymbol{\varphi}_h \in \mathcal{K}_h(\mathbf{m}_h^n)$

$$\begin{aligned} & \alpha \langle \mathbf{v}_h^n, \boldsymbol{\varphi}_h \rangle_\Omega + \langle \mathbf{m}_h^n \times \mathbf{v}_h^n, \boldsymbol{\varphi}_h \rangle_\Omega \\ & = -C_{\text{ex}} \langle \nabla \mathbf{m}_h^n, \nabla \boldsymbol{\varphi}_h \rangle_\Omega + \langle \pi_h(\mathbf{m}_h^n), \boldsymbol{\varphi}_h \rangle_\Omega + \langle \mathbf{f}_h, \boldsymbol{\varphi}_h \rangle_\Omega. \end{aligned} \quad (4.12)$$

(b) Definiere $\mathbf{m}_h^{n+1} \in \mathcal{M}_h$ durch

$$\mathbf{m}_h^{n+1}(\mathbf{z}_h) := \frac{\mathbf{m}_h^n(\mathbf{z}_h) + k\mathbf{v}_h^n(\mathbf{z}_h)}{|\mathbf{m}_h^n(\mathbf{z}_h) + k\mathbf{v}_h^n(\mathbf{z}_h)|} \quad \text{für alle } \mathbf{z}_h \in \mathcal{N}_h. \quad (4.13)$$

Output: Approximationen $\mathbf{m}_h^n \approx \mathbf{m}(nT/N)$ für alle $n = 0, \dots, N$.

Algorithmus 4.1 ist für alle $k > 0$ wohldefiniert.

Theorem 4.2. *Algorithmus 4.1 ist wohldefiniert, d.h. für alle $n = 0, 1, \dots, N - 1$ ist Gleichung (4.12) eindeutig lösbar und der Nenner in (4.13) ist stets positiv.*

Beweis. Mit der Bilinearform $a(\mathbf{m}_h; \cdot, \cdot)$ definiert als

$$a(\mathbf{m}_h; \boldsymbol{\psi}_h, \boldsymbol{\varphi}_h) := \alpha \langle \boldsymbol{\psi}_h, \boldsymbol{\varphi}_h \rangle_\Omega + \langle \mathbf{m}_h \times \boldsymbol{\psi}_h, \boldsymbol{\varphi}_h \rangle_\Omega$$

kann für alle $n = 0, 1, \dots, N - 1$ die linke Seite von (4.12) als $a(\mathbf{m}_h^n; \mathbf{v}_h^n, \boldsymbol{\varphi}_h)$ geschrieben werden. Wir nutzen die Orthogonalität (A.5) aus: Für die Bilinearform $a(\mathbf{m}_h; \cdot, \cdot)$ und beliebiges $\boldsymbol{\varphi}_h \in \mathcal{K}_h(\mathbf{m}_h)$ gilt

$$a(\mathbf{m}_h; \boldsymbol{\varphi}_h, \boldsymbol{\varphi}_h) = \alpha \|\boldsymbol{\varphi}_h\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)}^2.$$

Da $\alpha > 0$, definiert die Bilinearform $a(\mathbf{m}_h; \cdot, \cdot)$ eine zu $\|\cdot\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)}$ äquivalente Norm auf $\mathcal{K}_h(\mathbf{m}_h)$. Die eindeutige Lösbarkeit folgt nun aus dem Lemma von Lax–Milgram (Lemma A.1).

Der Nenner in (4.13) ist stets ungleich 0, da $\mathbf{v}_h^n \in \mathcal{K}_h(\mathbf{m}_h^n)$ für alle $n = 0, 1, \dots, N - 1$, siehe Lemma 3.4. \square

In [AJ06] wird folgendes Konvergenzresultat bewiesen.

Theorem 4.3 ([AJ06, Theorem 2.1(b)]). *Sei $\{\mathcal{T}_h\}_{h>0}$ eine Folge regulärer Triangulierungen von Ω . Sei $\mathbf{m}^0 \in \mathbf{H}^2(\Omega)$ mit $|\mathbf{m}^0| = 1$ fast überall in Ω und $\mathbf{m}_h^0 := \mathcal{I}_h \mathbf{m}^0 \in \mathcal{M}_h$ mit dem nodalen Interpolant $\mathcal{I}_h: \mathbf{H}^2(\Omega) \rightarrow \mathbf{V}_h$. Der Operator $\boldsymbol{\pi}: \mathbf{L}^2(\Omega) \rightarrow \mathbf{L}^2(\Omega)$ sei stetig. Weiter gelte $\boldsymbol{\pi}_h = \boldsymbol{\pi}$ und $\mathbf{f}_h = \mathbf{f}$. Zu gegebenen $h, k > 0$ bezeichne \mathbf{m}_{hk} die lineare Interpolation in der Zeit des Outputs $(\mathbf{m}_h^n)_{n=0}^{T/k}$ von Algorithmus 4.1, vgl. (3.1b). Dann gilt*

(i) *Für alle $h > 0$ existiert ein $\mathbf{m}_h \in \mathbf{H}^1(\Omega_T)$ und eine Teilfolge $(\mathbf{m}_{hk'})_{k'} \subset (\mathbf{m}_{hk})_k$, sodass $\mathbf{m}_{hk'} \rightharpoonup \mathbf{m}_h$ in $\mathbf{H}^1(\Omega_T)$ für $k' \rightarrow 0$.*

(ii) *Es existiert ein $\mathbf{m} \in \mathbf{H}^1(\Omega_T)$ und eine Teilfolge $(\mathbf{m}_{h'})_{h'} \subset (\mathbf{m}_h)$, sodass $\mathbf{m}_{h'} \rightharpoonup \mathbf{m}$ in $\mathbf{H}^1(\Omega_T)$ für $h' \rightarrow 0$. Dieses $\mathbf{m} \in \mathbf{H}^1(\Omega_T)$ ist eine schwache Lösung von LLG im Sinne von Definition 2.2. \square*

Bemerkung 4.4. (i) *Theorem 4.3 liefert eine Konstruktion schwacher Lösungen von LLG, insbesondere beweist es die Existenz schwacher Lösungen im Sinne von Definition 2.2, vgl. [AJ06, Remark 2.1].*

(ii) *Theorem 4.3 formuliert keine scharfe notwendige Beziehung zwischen den Diskretisierungsparametern $h, k > 0$. Anstatt eine konkrete CFL-Bedingung zu fordern, wird im Theorem und dessen Beweis großzügig zuerst der Limes für $k \rightarrow 0$ und dann der Limes für $h \rightarrow 0$ gebildet. Dass die Konvergenzanalyse dahingehend verbessert werden könnte, merken die Autoren auch in ihrer Arbeit an: A more refined result would give a link between the speeds at which h and δt go to 0, ...; [AJ06, Kapitel 3.2].*

(iii) *In [BKP08] wird die Konvergenzanalyse präzisiert und bewiesen, dass die konkrete CFL-Bedingung $k = \mathbf{o}(h^{5/2})$ hinreichend für die Konvergenzaussage von Theorem 4.3 ist.*

(iv) *In [Alo08] wird diese Bedingung weiter abgeschwächt und gezeigt, dass bereits die CFL-Bedingung $k = \mathbf{o}(h^2)$ hinreichend für die Konvergenzaussage von Theorem 4.3 ist. Wir fassen die Kernpunkte der Arbeit im folgenden Kapitel 4.2 zusammen.*

(v) Es ist festzuhalten, dass dieser Algorithmus im Gegensatz zu den zu diesem Zeitpunkt bekannten Algorithmen ohne die Verwendung von Straftermen auskommt; vgl [AJ06, p. 302]. Der Algorithmus ist insofern attraktiv, dass nur das Lösen eines linearen Gleichungssystems pro Zeitschritt notwendig ist.

4.2. Tangent-Plane-Integrator, θ -Schema

Der in Kapitel 4.1 vorgestellte Algorithmus ist voll explizit in der Zeit, und wie in Bemerkung 4.4 bereits erwähnt, müssen die Diskretisierungsparameter $k, h > 0$ eine restriktive CFL-Bedingung erfüllen. In [Alo08] wird Algorithmus 4.1 zu einem impliziten Schema, ähnlich dem θ -Schema für die Wärmeleitungsgleichung, verallgemeinert. Durch diese Modifikation kann wie bei der Wärmeleitungsgleichung für die Wahl $\theta \in (1/2, 1]$ unbedingte Konvergenz gegen eine schwache Lösung gezeigt werden, d.h. auf eine CFL-Bedingung an die Diskretisierungsparameter $k, h > 0$ kann verzichtet werden.

Bemerkung 4.5. In der Originalarbeit [Alo08] wird nur der Spezialfall $\mathbf{h}_{\text{eff}}(\mathbf{m}) = C_{\text{ex}}\Delta\mathbf{m}$ betrachtet. Der Algorithmus und die Konvergenzanalyse werden erst später in [AKT12] auf allgemeines effektives Feld $\mathbf{h}_{\text{eff}}(\mathbf{m}) = C_{\text{ex}}\Delta\mathbf{m} + \boldsymbol{\pi}(\mathbf{m}) + \mathbf{f}$, sowie in [Gol12] zusätzlich auf Diskretisierungen $\boldsymbol{\pi}_h, \mathbf{f}_h$ von $\boldsymbol{\pi}, \mathbf{f}$, erweitert. Unsere Präsentation formulieren wir auch für allgemeines effektives Feld $\mathbf{h}_{\text{eff}} = C_{\text{ex}}\Delta\mathbf{m} + \boldsymbol{\pi}(\mathbf{m}) + \mathbf{f}$.

Die Idee besteht darin, nur den Term höchster Ordnung auf der rechten Seite im Gleichungssystem (4.12) implizit zu behandeln, d.h. für $\theta \in [0, 1]$ ersetzen wir

$$C_{\text{ex}}\langle \nabla \mathbf{m}_h^n, \nabla \varphi_h \rangle_{\Omega} \rightsquigarrow C_{\text{ex}}\langle \nabla (\mathbf{m}_h^n + \theta k \mathbf{v}_h^n), \nabla \varphi_h \rangle_{\Omega}, \quad (4.14)$$

wobei $k = T/N$ die Zeitschrittweite bezeichnet. Diese Modifikation führt auf folgenden Algorithmus.

Algorithmus 4.6 (Tangent-Plane-Integrator, θ -Schema; [Alo08]). **Input:** Approximation $\mathbf{m}_h^0 \in \mathcal{M}_h$ an die Anfangsmagnetisierung \mathbf{m}^0 , Zeitschrittweite $k = T/N > 0$ mit $N \in \mathbb{N}$, sowie $\theta \in [0, 1]$.

Loop: Für $n = 0, 1, \dots, N-1$ iteriere die folgenden Schritte (a)–(b):

(a) Berechne $\mathbf{v}_h^n \in \mathcal{K}_h(\mathbf{m}_h^n)$, sodass für alle $\varphi_h \in \mathcal{K}_h(\mathbf{m}_h^n)$

$$\begin{aligned} & \alpha \langle \mathbf{v}_h^n, \varphi_h \rangle_{\Omega} + \langle \mathbf{m}_h^n \times \mathbf{v}_h^n, \varphi_h \rangle_{\Omega} + \theta k C_{\text{ex}} \langle \nabla \mathbf{v}_h^n, \nabla \varphi_h \rangle_{\Omega} \\ & = -C_{\text{ex}} \langle \nabla \mathbf{m}_h^n, \nabla \varphi_h \rangle_{\Omega} + \langle \boldsymbol{\pi}_h(\mathbf{m}_h^n), \varphi_h \rangle_{\Omega} + \langle \mathbf{f}_h, \varphi_h \rangle_{\Omega}. \end{aligned} \quad (4.15)$$

(b) Definiere $\mathbf{m}_h^{n+1} \in \mathcal{M}_h$ durch

$$\mathbf{m}_h^{n+1}(\mathbf{z}_h) := \frac{\mathbf{m}_h^n(\mathbf{z}_h) + k \mathbf{v}_h(\mathbf{z}_h)}{|\mathbf{m}_h^n(\mathbf{z}_h) + k \mathbf{v}_h(\mathbf{z}_h)|} \quad \text{für alle } \mathbf{z}_h \in \mathcal{N}_h. \quad (4.16)$$

Output: Approximationen $\mathbf{m}_h^n \approx \mathbf{m}(nT/N)$ für alle $n = 0, \dots, N$.

Genauso wie Algorithmus 4.1 ist auch dieser Algorithmus für alle $k > 0$ wohldefiniert.

Theorem 4.7. *Algorithmus 4.6 ist wohldefiniert, d.h. für alle $n = 0, 1, \dots, N - 1$ ist Gleichung (4.15) eindeutig lösbar und der Nenner in (4.16) ist stets positiv.*

Beweis. Für $\theta = 0$ entspricht die Aussage genau jener von Theorem 4.2. Wir beweisen die Aussage für $\theta \in (0, 1]$. Mit der Bilinearform $a(\mathbf{m}_h; \cdot, \cdot)$ definiert als

$$a(\mathbf{m}_h; \boldsymbol{\psi}_h, \boldsymbol{\varphi}_h) := \alpha \langle \boldsymbol{\psi}_h, \boldsymbol{\varphi}_h \rangle_\Omega + \langle \mathbf{m}_h \times \boldsymbol{\psi}_h, \boldsymbol{\varphi}_h \rangle_\Omega + \theta k C_{\text{ex}} \langle \nabla \boldsymbol{\psi}_h, \nabla \boldsymbol{\varphi}_h \rangle_\Omega$$

kann für alle $n = 0, 1, \dots, N - 1$ die linke Seite von (4.15) als $a(\mathbf{m}_h^n; \mathbf{v}_h^n, \boldsymbol{\varphi}_h)$ geschrieben werden. Wir nutzen die Orthogonalität (A.5) aus: Für die Bilinearform $a(\mathbf{m}_h; \cdot, \cdot)$ und beliebiges $\boldsymbol{\varphi}_h \in \mathcal{K}_h(\mathbf{m}_h)$ gilt

$$a(\mathbf{m}_h; \boldsymbol{\varphi}_h, \boldsymbol{\varphi}_h) = \alpha \|\boldsymbol{\varphi}_h\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)}^2 + \theta k C_{\text{ex}} \|\nabla \boldsymbol{\varphi}_h\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)}^2.$$

Da $\alpha > 0$ und $\theta k C_{\text{ex}} > 0$, definiert die Bilinearform $a(\mathbf{m}_h; \cdot, \cdot)$ eine zu $\|\cdot\|_{\mathbf{H}^1(\Omega)}$ äquivalente Norm auf $\mathcal{K}_h(\mathbf{m}_h)$. Die eindeutige Lösbarkeit folgt nun aus dem Lemma von Lax–Milgram (Lemma A.1).

Der Nenner in (4.16) ist stets ungleich 0, da $\mathbf{v}_h^n \in \mathcal{K}_h(\mathbf{m}_h^n)$ für alle $n = 0, 1, \dots, N - 1$, siehe Lemma 3.4. \square

Die Konvergenzanalyse in [Alo08] ist insofern präziser als jene in [AJ06], dass eine für Konvergenz hinreichende Beziehung zwischen den Diskretisierungsparametern $h, k > 0$ angegeben wird. Für $\mathbf{h}_{\text{eff}}(\mathbf{m}) = C_{\text{ex}} \Delta \mathbf{m}$ ist folgendes Resultat in [Alo08] zu finden. Die Version für allgemeines effektives Feld wird in [AKT12, Gol12] bewiesen. Die Analysis in [Gol12, Kapitel 3] deckt zusätzlich Diskretisierungen $\boldsymbol{\pi}_h, \mathbf{f}_h$ von $\boldsymbol{\pi}, \mathbf{f}$ ab.

Theorem 4.8 ([Alo08, Theorem 2 und Remark 1], [AKT12, Theorem 2], [Gol12, Theorem 3.3.7]). *Sei $\{\mathcal{T}_h\}_{h>0}$ eine Folge regulärer Triangulierungen von Ω , welche die Winkelbedingung aus Definition 3.3 erfüllen. Sei $\mathbf{m}^0 \in \mathbf{H}^1(\Omega)$ mit $|\mathbf{m}^0| = 1$ fast überall in Ω und es gelte $\mathbf{m}_h^0 \rightarrow \mathbf{m}^0$ in $\mathbf{H}^1(\Omega)$ für $h \rightarrow 0$. Es gelte für $p = 2, 4$ und alle $h > 0$*

$$\|\boldsymbol{\pi}(\boldsymbol{\varphi}_h) + \mathbf{f}\|_{\mathbf{L}^p(\Omega)} \leq C_1 \|\boldsymbol{\varphi}_h\|_{\mathbf{L}^p(\Omega)} + C_2 \quad \text{für alle } \boldsymbol{\varphi}_h \in \mathbf{V}_h,$$

mit von $h > 0$ unabhängigen Konstanten $C_1, C_2 > 0$. Weiter gelte $\boldsymbol{\pi}_h = \boldsymbol{\pi}$ und $\mathbf{f}_h = \mathbf{f}$. Zu gegebenen $h, k > 0$ bezeichne \mathbf{m}_{hk} die lineare Interpolation in der Zeit des Outputs $(\mathbf{m}_h^n)_{n=0}^{T/k}$ von Algorithmus 4.6, vgl. (3.1b). Dann existiert eine schwache Lösung $\mathbf{m} \in \mathbf{H}^1(\Omega)$ im Sinne von Definition 2.2 und eine Teilfolge von \mathbf{m}_{hk} die wir ebenso bezeichnen, sodass $\mathbf{m}_{hk} \rightharpoonup \mathbf{m}$ in $\mathbf{H}^1(\Omega)$ für $h, k \rightarrow 0$. Für $1/2 < \theta \leq 1$ ist die Konvergenz unbedingt, für $\theta = 1/2$ ist $k = \mathbf{o}(h)$ hinreichend, für $0 \leq \theta < 1/2$ ist $k = \mathbf{o}(h^2)$ hinreichend. \square

Bemerkung 4.9. (i) *Algorithmus 4.6 ist eine Verallgemeinerung von Algorithmus 4.1. Für $\theta = 0$ stimmen die Verfahren überein. Theorem 4.8 mit $\theta = 0$ verbessert die Konvergenzaussage aus [BKP08], vgl. Bemerkung 4.4(ii)–(iv).*

(ii) *Das Verfahren ist für $1/2 < \theta \leq 1$ unbedingt konvergent für $h, k \rightarrow 0$ und erfordert in jedem Zeitschritt nur das Lösen eines linearen Gleichungssystems (4.15).*

(iii) *Terme niedrigerer Ordnung $\boldsymbol{\pi}(\mathbf{m})$ und \mathbf{f} des effektiven Felds können weiterhin explizit in der Zeit behandelt werden, ohne Stabilität zu verlieren.*

(iv) Ähnlich wie bei der Wärmeleitungsgleichung liegt die Vermutung nahe, für die Wahl $\theta = 1/2$ ein Verfahren zweiter Ordnung in der Zeit zu erhalten. Das ist hier aber bereits für $\mathbf{h}_{\text{eff}}(\mathbf{m}) = \Delta \mathbf{m}$ aufgrund des nichtlinearen Projektionsschritts (4.16) nicht der Fall. Im folgenden Experiment 4.10 belegen wir diese Aussage numerisch. In Proposition 4.15 zeigen wir mathematisch, dass maximal erste Ordnung erwartet werden kann.

Experiment 4.10. Ziel: Wir wollen die Konvergenzrate (in der Zeitschrittweite k) von Algorithmus 4.6 für verschiedene Werte von $\theta \in [0, 1]$ untersuchen. Insbesondere wollen wir belegen, dass die Wahl $\theta = 1/2$ bereits für den Spezialfall $\mathbf{h}_{\text{eff}}(\mathbf{m}) = C_{\text{ex}} \Delta \mathbf{m}$ nicht auf eine bessere Konvergenzordnung in der Zeit führt.

Setting: Auf dem Gebiet $\Omega = (-1.6, 1.2) \times (-0.3, 0.3) \times (-0.025, 0.025)$ sei die Anfangsbedingung \mathbf{m}^0 durch

$$\mathbf{m}^0(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} \sqrt{1 - g(\mathbf{x})^2} \\ 0 \\ g(\mathbf{x}) \end{pmatrix} \quad \text{mit } g(\mathbf{x}) := \begin{cases} -1 & \text{für } x_1 \leq -1, \\ x_1(x_1 + 2) & \text{für } -1 < x_1 \leq 0, \\ -x_1(x_1 - 2) & \text{für } 0 < x_1 \leq 1, \\ 1 & \text{für } 1 < x_1, \end{cases}$$

gegeben (siehe Abbildung 4.2(a)).

Parameter: Wir betrachten den Spezialfall, dass $\mathbf{h}_{\text{eff}}(\mathbf{m}) = C_{\text{ex}} \Delta \mathbf{m}$, d.h. $\pi(\mathbf{m}) = \mathbf{0}$ und $\mathbf{f} = \mathbf{0}$. Wir wählen $C_{\text{ex}} = 1/100$, $\alpha = 1$ und simulieren die Dynamik bis zum Zeitpunkt $T = 24$.

Diskretisierung: Die Geometrie diskretisieren wir durch eine Triangulierung \mathcal{T}_h (Abbildung 4.1) mit maximalem Elementdurchmesser $h = 0.05$ erzeugt in Netgen [Sch], bestehend aus 4582 Tetraedern, respektive 1655 Knoten. Für die Zeiddiskretisierung verwenden wir verschiedene Zeitschrittweiten $k = 2^\ell \cdot k_{\text{ref}}$ für $\ell \in \{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$ und $k_{\text{ref}} = 10^{-4}$.

Verfahren: Wir verwenden Algorithmus 4.6 (TPS1) mit den verschiedenen Wahlen $\theta = 0$, $\theta = 0.5$ und $\theta = 1$, um eine approximative Lösung \mathbf{m}_{hk} zu berechnen. Wir lösen die auftretenden linearen Gleichungssysteme wie in Kapitel 6 beschrieben mit einer Genauigkeit von $\tau = 10^{-10}$.

Referenzlösung: Da keine analytische Lösung bekannt ist, berechnen wir die Referenzlösung mit einer feineren Zeitschrittweite und einem exakteren Algorithmus: Wir verwenden zur Berechnung der Referenzlösung $\mathbf{m}_{hk_{\text{ref}}}$ unseren effizienten Tangent-Plane-Integrator zweiter Ordnung (Algorithmus 4.34 aus Kapitel 4.4) mit $k = k_{\text{ref}}$ und den kanonischen Wahlen $M(k) = 1/|k \log k|$ und $\rho(k) = |k \log k|$.

Diskussion: In Abbildung 4.3(a) vergleichen wir die Fehler

$$\max_{n \in \{1, \dots, N\}} \|\mathbf{m}_{hk_{\text{ref}}}(t_n) - \mathbf{m}_{hk}(t_n)\|_{L^2(\Omega)}$$

für verschiedene Wahlen von θ und k . Für den größten Zeitschritt ist die zu erwartende Instabilität für die voll-explizite Wahl $\theta = 0$ gut zu erkennen. Weiter sehen wir, dass die Crank–Nicolson-artige Wahl $\theta = 1/2$ zwar zu einer höheren Genauigkeit führt als die extremen Wahlen $\theta = 0$ und $\theta = 1$, aber ebenfalls nur Konvergenz erster Ordnung in der Zeit liefert. Es sei angemerkt, dass wir auch für eine mit TPS1, $\theta = 0.5$ und $k = k_{\text{ref}}$ berechnete Referenzlösung nur Konvergenz erster Ordnung beobachten (ohne Abbildung).

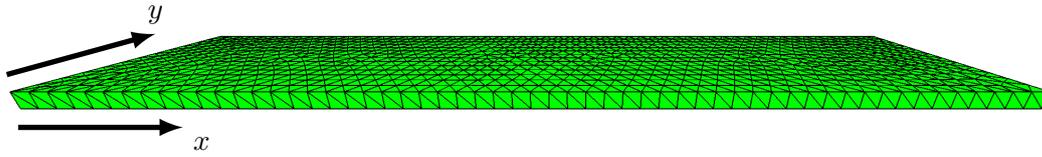


Abbildung 4.1.: Triangulierung \mathcal{T}_h von Ω in Experiment 4.10.

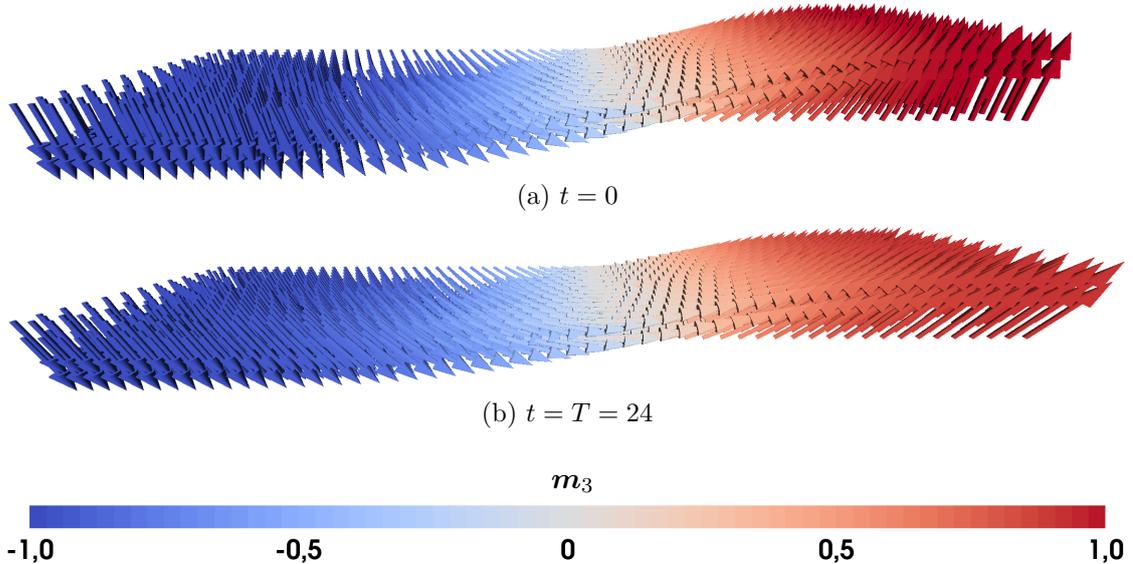
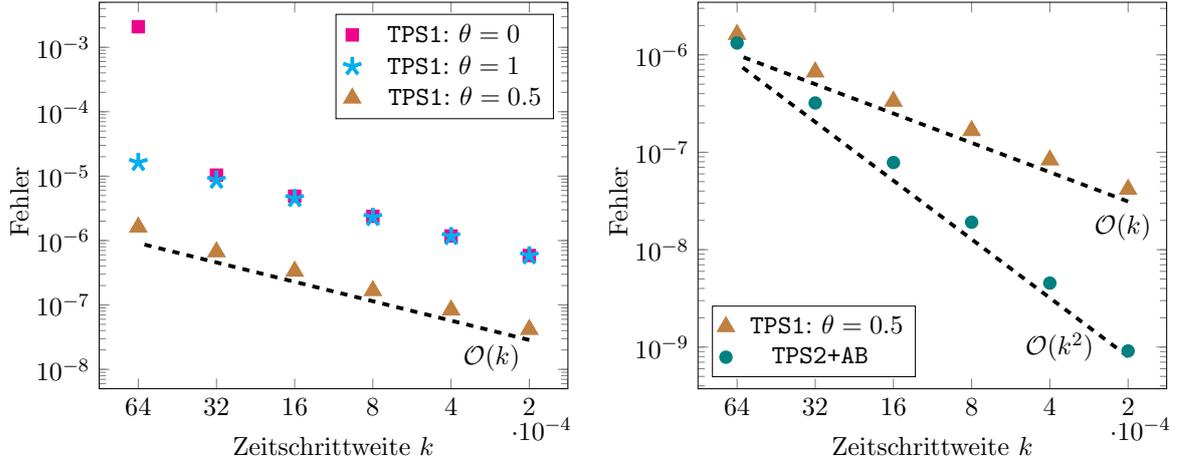


Abbildung 4.2.: Magnetisierung zu Beginn und am Ende von Experiment 4.10.

Um zu zeigen, dass das gewählte Beispiel Konvergenz zweiter Ordnung erlaubt, rechnen wir das Experiment ebenfalls mit unserem effizienten Tangent-Plane-Integrator (TPS2+AB) und verschiedenen Zeitschrittweiten k . Abbildung 4.3(b) zeigt, dass für TPS2+AB der Fehler zur Referenzlösung quadratisch in der Zeitschrittweite k fällt.

4.3. Tangent-Plane-Integrator, zweite Ordnung in der Zeit

In diesem Abschnitt präsentieren wir eine Modifikation von Algorithmus 4.6, welche formal einen in der Zeitschrittweite $k > 0$ kubischen Konsistenzfehler garantiert. Folglich hat der darauf basierende Algorithmus das Potential konvergent zweiter Ordnung in der Zeit zu sein. Die Idee wurde zum ersten Mal in [AKT12] vorgestellt, und später in [AKST14] präzisiert und analysiert. In diesem Abschnitt fassen wir die Ergebnisse aus [AKST14] zusammen.



(a) Verschiedene Wahlen von θ für Algorithmus 4.6 (TPS1) im Vergleich.

(b) Algorithmus 4.6 (TPS1) für $\theta = 0.5$ im Vergleich mit Algorithmus 4.34 (TPS2+AB).

Abbildung 4.3.: Ergebnisse von Experiment 4.10: Zur Berechnung der Referenzlösung verwenden wir Algorithmus 4.34 (TPS2+AB) mit $k = k_{\text{ref}} = 10^{-4}$. Wir stellen die Fehler $\max_{n \in \{1, \dots, N\}} \|\mathbf{m}_{hk_{\text{ref}}}(t_n) - \mathbf{m}_{hk}(t_n)\|_{L^2(\Omega)}$ in doppelt-logarithmischen Plots dar.

4.3.1. Motivation

Bei Crank–Nicolson-artigen Zeitschrittverfahren angewandt auf ein nichtlineares parabolisches Modellproblem kann man Konvergenz zweiter Ordnung in der Zeit erwarten, siehe [Tho06, Theorem 13.4]. Um den Nutzen dieser weiteren Modifikation zu motivieren, zeigen wir zunächst, dass man aufgrund des Projektionsschritts (4.16) für Algorithmus 4.6 mit jeder Wahl von θ , insbesondere auch für die Crank–Nicolson-artige Wahl $\theta = 1/2$ nur Konvergenz erster Ordnung in der Zeit erwarten kann. Um das zu beweisen, benötigen wir die folgende Definition und drei Lemmas.

Definition 4.11. Für $\psi \in C^\infty(\bar{\Omega})$ mit $|\psi| = 1$, definiere die punktweise Projektion auf den Tangentialraum $\mathcal{K}(\psi)$ durch

$$\mathcal{P}_\psi: C^\infty(\bar{\Omega}) \rightarrow C^\infty(\bar{\Omega}), \quad \mathcal{P}_\psi(\mathbf{u}) := \mathbf{u} - (\mathbf{u} \cdot \psi)\psi. \quad (4.17)$$

Im folgenden Lemma halten wir einige grundlegende Eigenschaften von \mathcal{P}_ψ aus Definition 4.11 fest.

Lemma 4.12. Seien $\psi \in C^\infty(\bar{\Omega})$ mit $|\psi| = 1$, $\mathbf{w} \in \mathcal{K}(\psi)$ und $\mathbf{u} \in C^\infty(\bar{\Omega})$. Dann erfüllt \mathcal{P}_ψ die folgenden Eigenschaften (i)–(v):

- (i) $\mathbf{u} = \mathcal{P}_\psi(\mathbf{u}) + (\mathbf{u} \cdot \psi)\psi$,
- (ii) $\mathcal{P}_\psi(\psi) = 0$,
- (iii) $\mathcal{P}_\psi(\mathbf{w}) = \mathbf{w}$,

$$(iv) \mathcal{P}_\psi(\mathbf{u}) \cdot \mathbf{w} = \mathbf{u} \cdot \mathbf{w},$$

$$(v) \mathcal{P}_\psi(\psi \times \mathbf{u}) = \psi \times \mathbf{u} = \psi \times \mathcal{P}_\psi(\mathbf{u}).$$

Beweis. Die Aussagen folgen direkt aus der Definition 4.11 von $\mathcal{P}_\psi(\mathbf{u}) := \mathbf{u} - (\mathbf{u} \cdot \psi)\psi$.
ad (i). Wir addieren und subtrahieren die Projektion von \mathbf{u} in Richtung ψ . Es folgt

$$\mathbf{u} = \mathbf{u} - (\mathbf{u} \cdot \psi)\psi + (\mathbf{u} \cdot \psi)\psi = \mathcal{P}_\psi(\mathbf{u}) + (\mathbf{u} \cdot \psi)\psi.$$

ad (ii). Wir verwenden die Voraussetzung $|\psi| = 1$ und erhalten

$$\mathcal{P}_\psi(\psi) = \psi - (\psi \cdot \psi)\psi = \psi - \psi = \mathbf{0}.$$

ad (iii). Wir nutzen aus, dass $\mathbf{w} \in \mathcal{K}(\psi)$, d.h. \mathbf{w} steht orthogonal auf ψ . Es folgt

$$\mathcal{P}_\psi(\mathbf{w}) = \mathbf{w} - (\mathbf{w} \cdot \psi)\psi = \mathbf{w} - \mathbf{0} = \mathbf{w}.$$

ad (iv). Diese Aussage folgt ebenfalls, da \mathbf{w} orthogonal auf ψ steht. Es gilt nämlich

$$\mathcal{P}_\psi(\mathbf{u}) \cdot \mathbf{w} = \mathbf{u} \cdot \mathbf{w} - (\mathbf{u} \cdot \psi)\psi \cdot \mathbf{w} = \mathbf{u} \cdot \mathbf{w}.$$

ad (v). Die erste Identität folgt aus der Orthogonalität von $\psi \times \mathbf{u}$ zu ψ . Es gilt

$$\mathcal{P}_\psi(\psi \times \mathbf{u}) = \psi \times \mathbf{u} - ((\psi \times \mathbf{u}) \cdot \psi)\psi = \psi \times \mathbf{u}.$$

Die zweite Identität gilt, da $\psi \times \psi = \mathbf{0}$. Damit sehen wir

$$\psi \times \mathbf{u} = \psi \times \mathcal{P}_\psi(\mathbf{u}) + \psi \times ((\mathbf{u} \cdot \psi)\psi) = \psi \times \mathcal{P}_\psi \mathbf{u}.$$

Das schließt den Beweis. □

Lemma 4.13. Sei $\mathbf{m} \in C^\infty(\overline{\Omega_T})$ mit $|\mathbf{m}| = 1$ in Ω_T . Dann gilt

$$|\mathbf{m}_t|^2 = -\mathbf{m} \cdot \mathbf{m}_{tt} \quad \text{in } \Omega_T. \quad (4.18)$$

Beweis. Da $|\mathbf{m}| = 1$ zeigt eine direkte Rechnung

$$0 = \frac{1}{2} \frac{d^2}{dt^2} |\mathbf{m}|^2 = \frac{d}{dt} (\mathbf{m} \cdot \mathbf{m}_t) = \mathbf{m} \cdot \mathbf{m}_{tt} + \mathbf{m}_t \cdot \mathbf{m}_t.$$

Das schließt den Beweis. □

Lemma 4.14. Für $k > 0$ und $\mathbf{u}, \mathbf{w} \in \mathbb{R}^3$ mit $|\mathbf{u}| = 1$ und $\mathbf{u} \cdot \mathbf{w} = 0$ gilt

$$\frac{\mathbf{u} + k\mathbf{w}}{|\mathbf{u} + k\mathbf{w}|} = \mathbf{u} + k\mathbf{w} - \frac{k^2}{2} |\mathbf{w}|^2 \mathbf{u} + \mathcal{O}(k^3). \quad (4.19)$$

Beweis. Die Aussage folgt aus der Taylor-Entwicklung bis zum quadratischen Glied von

$$f: k \mapsto \frac{\mathbf{u} + k\mathbf{w}}{|\mathbf{u} + k\mathbf{w}|}$$

um $k = 0$. Wir leiten die Funktion nach k ab und verwenden die Voraussetzungen $|\mathbf{u}| = 1$ sowie $\mathbf{u} \cdot \mathbf{w} = 0$. Es gilt

$$\begin{aligned} f' : k &\mapsto \frac{\mathbf{w}}{|\mathbf{u} + k\mathbf{w}|} - k|\mathbf{w}|^2 \frac{\mathbf{u} + k\mathbf{w}}{|\mathbf{u} + k\mathbf{w}|^3}, \\ f'' : k &\mapsto -|\mathbf{w}|^2 \frac{\mathbf{u}}{|\mathbf{u} + k\mathbf{w}|^3} - 3k|\mathbf{w}|^2 \frac{\mathbf{w}}{|\mathbf{u} + k\mathbf{w}|^3} + 3k^2|\mathbf{w}|^4 \frac{\mathbf{u} + k\mathbf{w}}{|\mathbf{u} + k\mathbf{w}|^5}, \\ f''' : k &\mapsto -3|\mathbf{w}|^3 \frac{\mathbf{w}}{|\mathbf{u} + k\mathbf{w}|^3} + 9k|\mathbf{w}| \frac{\mathbf{u} + k\mathbf{w}}{|\mathbf{u} + k\mathbf{w}|^5} + 9k^2|\mathbf{w}|^4 \frac{\mathbf{u}}{|\mathbf{u} + k\mathbf{w}|^5} - 15k^3|\mathbf{w}|^6 \frac{\mathbf{u} + k\mathbf{w}}{|\mathbf{u} + k\mathbf{w}|^7}. \end{aligned}$$

Mit Taylor gilt nun die Darstellung

$$\begin{aligned} f(k) &= f(0) + kf'(0) + \frac{k^2}{2}f''(0) + \int_0^k \frac{(k-\kappa)^2}{2}f'''(\kappa) \, d\kappa \\ &= \mathbf{u} + k\mathbf{w} - \frac{k^2}{2}|\mathbf{w}|^2\mathbf{u} + \mathcal{O}(k^3). \end{aligned}$$

Das schließt den Beweis. □

Proposition 4.15. Sei $\mathbf{m} \in C^\infty(\overline{\Omega_T})$ mit $|\mathbf{m}| = 1$. Für $t \in [0, T - k]$ definiere

$$\mathbf{v}(t) := \mathbf{m}_t(t). \quad (4.20)$$

Dann gilt

$$\frac{\mathbf{m}(t) + k\mathbf{v}(t)}{|\mathbf{m}(t) + k\mathbf{v}(t)|} = \mathbf{m}(t+k) + \Omega(k^2) \quad \text{für alle } t \in (0, T - k). \quad (4.21)$$

Beweis. Wir verwenden Lemma 4.14 mit $\mathbf{u} := \mathbf{m}(t)$ und $\mathbf{w} := \mathbf{v}(t)$. Aus (4.20) und (4.18) folgt

$$\begin{aligned} \frac{\mathbf{m}(t) + k\mathbf{v}(t)}{|\mathbf{m}(t) + k\mathbf{v}(t)|} &\stackrel{(4.19)}{=} \mathbf{m}(t) + k\mathbf{m}_t(t) - \frac{k^2}{2}|\mathbf{m}_t(t)|^2 \mathbf{m}(t) + \mathcal{O}(k^3) \\ &\stackrel{(4.18)}{=} \mathbf{m}(t) + k\mathbf{m}_t(t) + \frac{k^2}{2}(\mathbf{m}(t) \cdot \mathbf{m}_{tt}(t)) \mathbf{m}(t) + \mathcal{O}(k^3). \end{aligned} \quad (4.22)$$

Die Taylor-Entwicklung bis zum zweiten Glied von $k \mapsto \mathbf{m}(t+k)$ um $k = 0$ lautet

$$\mathbf{m}(t+k) = \mathbf{m}(t) + k\mathbf{m}_t(t) + \frac{k^2}{2}\mathbf{m}_{tt}(t) + \mathcal{O}(k^3). \quad (4.23)$$

Ausnutzen der Identitäten (4.22)–(4.23) und Lemma 4.12(i) liefert nun

$$\begin{aligned} \mathbf{m}(t+k) - \frac{\mathbf{m}(t) + k\mathbf{v}(t)}{|\mathbf{m}(t) + k\mathbf{v}(t)|} &= \frac{k^2}{2}\mathbf{m}_{tt}(t) - \frac{k^2}{2}(\mathbf{m}(t) \cdot \mathbf{m}_{tt}(t))\mathbf{m}(t) + \mathcal{O}(k^3) \\ &= \frac{k^2}{2}\mathcal{P}_{\mathbf{m}(t)}\mathbf{m}_{tt}(t) + \mathcal{O}(k^3) \\ &= \Omega(k^2). \end{aligned}$$

Das schließt den Beweis. □

Proposition 4.15 zeigt, dass die Wahl $\mathbf{v}(t) := \mathbf{m}_t(t)$ in Kombination mit der Updateformel

$$\mathbf{m}(t+k) \approx \frac{\mathbf{m}(t) + k\mathbf{v}(t)}{|\mathbf{m}(t) + k\mathbf{v}(t)|} \quad (4.24)$$

bereits auf dem kontinuierlichen Level nur einen in $k > 0$ quadratischen Konsistenzfehler zulässt und man somit nicht mehr als ein Verfahren erster Ordnung in der Zeit erwarten kann.

4.3.2. Konsistenzfehler höherer Ordnung

Nach Proposition 4.15 können wir für die Wahl $\mathbf{v} := \mathbf{m}_t$ ein Verfahren maximal erster Ordnung in der Zeit erwarten. Um einen Tangent-Plane-Integrator zweiter Ordnung zu erhalten, machen wir den Ansatz

$$\mathbf{v}(t) := \mathbf{m}_t(t) + \mathcal{P}_{\mathbf{m}(t)}\mathbf{y}(t) \in \mathcal{K}(\mathbf{m}(t)) \quad (4.25)$$

für eine Funktion $\mathbf{y}: \Omega_T \rightarrow \mathbb{R}^3$. Wir projizieren $\mathbf{y}(t)$ in (4.25) auf $\mathcal{K}(\mathbf{m}(t))$ um die Orthogonalität $\mathbf{m}(t) \cdot \mathbf{v}(t) = 0$ zu erhalten. Die Taylor-Entwicklung von $\mathbf{m}(t+k)$ lautet

$$\mathbf{m}(t+k) = \mathbf{m}(t) + k\mathbf{m}_t(t) + \frac{k^2}{2}\mathbf{m}_{tt}(t) + \mathcal{O}(k^2). \quad (4.26)$$

Nach Lemma 4.14 gilt

$$\begin{aligned} \frac{\mathbf{m}(t) + k\mathbf{v}(t)}{|\mathbf{m}(t) + k\mathbf{v}(t)|} &\stackrel{(4.19)}{=} \mathbf{m}(t) + k\mathbf{v}(t) - \frac{k^2}{2}|\mathbf{v}(t)|\mathbf{m}(t) + \mathcal{O}(k^3) \\ &\stackrel{(4.25)}{=} \mathbf{m}(t) + k\mathbf{m}_t(t) + k\mathcal{P}_{\mathbf{m}(t)}\mathbf{y}(t) \\ &\quad - \frac{k^2}{2}(|\mathbf{m}_t(t)|^2 + 2\mathbf{m}_t(t) \cdot \mathcal{P}_{\mathbf{m}(t)}\mathbf{y}(t) + |\mathcal{P}_{\mathbf{m}(t)}\mathbf{y}(t)|^2)\mathbf{m}(t) + \mathcal{O}(k^3). \end{aligned} \quad (4.27)$$

Kombinieren von Lemma 4.13 und Lemma 4.12(i) zeigt

$$\mathbf{m}_{tt}(t) + |\mathbf{m}_t(t)|^2\mathbf{m}(t) = \mathbf{m}_{tt}(t) - (\mathbf{m}(t) \cdot \mathbf{m}_{tt}(t))\mathbf{m}(t) = \mathcal{P}_{\mathbf{m}(t)}\mathbf{m}_{tt}(t). \quad (4.28)$$

Gleichsetzen von (4.26) und (4.27) sowie Einsetzen von (4.28) führt auf

$$k\mathcal{P}_{\mathbf{m}(t)}\mathbf{y}(t) - \frac{k^2}{2}(2\mathbf{m}_t(t) \cdot \mathcal{P}_{\mathbf{m}(t)}\mathbf{y}(t) + |\mathcal{P}_{\mathbf{m}(t)}\mathbf{y}(t)|^2)\mathbf{m}(t) \stackrel{!}{=} \frac{k^2}{2}\mathcal{P}_{\mathbf{m}(t)}\mathbf{m}_{tt}(t) + \mathcal{O}(k^3).$$

Da $\mathbf{m}(t)$ punktweise orthogonal auf $\mathcal{P}_{\mathbf{m}(t)}\mathbf{m}_{tt}(t)$ steht, folgt

$$\mathbf{y}(t) \stackrel{!}{=} \frac{k}{2}\mathbf{m}_{tt}(t) + \mathcal{O}(k^2). \quad (4.29)$$

Das motiviert nun die kanonische Wahl

$$\mathbf{v}(t) := \mathbf{m}_t(t) + \frac{k}{2}\mathcal{P}_{\mathbf{m}(t)}\mathbf{m}_{tt}(t)$$

um einen in k kubischen Konsistenzfehler zu erhalten. Im Gegensatz zu Proposition 4.15 gilt die folgende Aussage.

Proposition 4.16. *Sei $\mathbf{m} \in C^\infty(\overline{\Omega_T})$ mit $|\mathbf{m}| = 1$. Für $t \in [0, T - k]$ definiere*

$$\mathbf{v}(t) := \mathbf{m}_t(t) + \frac{k}{2}\mathcal{P}_{\mathbf{m}(t)}\mathbf{m}_{tt}(t). \quad (4.30)$$

Dann gilt

$$\frac{\mathbf{m}(t) + k\mathbf{v}(t)}{|\mathbf{m}(t) + k\mathbf{v}(t)|} = \mathbf{m}(t+k) + \mathcal{O}(k^3) \quad \text{für alle } t \in (0, T - k). \quad (4.31)$$

Beweis. Wir verwenden wieder Lemma 4.14 mit $\mathbf{u} := \mathbf{m}(t)$ und $\mathbf{w} := \mathbf{v}(t)$, wobei $\mathbf{v}(t)$ durch (4.30) definiert ist. Wir verwenden Lemma 4.13, fassen Terme höherer Ordnung in $\mathcal{O}(k^3)$ zusammen und erhalten

$$\begin{aligned} \frac{\mathbf{m}(t) + k\mathbf{v}(t)}{|\mathbf{m}(t) + k\mathbf{v}(t)|} &\stackrel{(4.19)}{=} \mathbf{m}(t) + k\mathbf{v}(t) - \frac{k^2}{2}|\mathbf{v}(t)|^2\mathbf{m}(t) + \mathcal{O}(k^3) \\ &\stackrel{(4.30)}{=} \mathbf{m}(t) + k\mathbf{m}_t(t) + \frac{k^2}{2}\mathcal{P}_{\mathbf{m}}\mathbf{m}_{tt}(t) - \frac{k^2}{2}|\mathbf{m}_t(t)|^2\mathbf{m}(t) + \mathcal{O}(k^3) \\ &\stackrel{(4.18)}{=} \mathbf{m}(t) + k\mathbf{m}_t(t) + \frac{k^2}{2}\mathcal{P}_{\mathbf{m}}\mathbf{m}_{tt}(t) + \frac{k^2}{2}(\mathbf{m}(t) \cdot \mathbf{m}_{tt}(t))\mathbf{m}(t) + \mathcal{O}(k^3). \end{aligned} \quad (4.32)$$

Aus dieser Identität erhalten wir nun mit Lemma 4.12(i)

$$\frac{\mathbf{m}(t) + k\mathbf{v}(t)}{|\mathbf{m}(t) + k\mathbf{v}(t)|} = \mathbf{m}(t) + k\mathbf{m}_t(t) + \frac{k^2}{2}\mathbf{m}_{tt}(t) + \mathcal{O}(k^3).$$

Die rechte Seite stimmt bis auf $\mathcal{O}(k^3)$ genau mit der Taylor-Entwicklung von $k \mapsto \mathbf{m}(t+k)$ um $k=0$

$$\mathbf{m}(t+k) = \mathbf{m}(t) + k\mathbf{m}_t(t) + \frac{k^2}{2}\mathbf{m}_{tt}(t) + \mathcal{O}(k^3)$$

überein. Insgesamt erhalten wir für die Differenz

$$\mathbf{m}(t+k) - \frac{\mathbf{m}(t) + k\mathbf{v}(t)}{|\mathbf{m}(t) + k\mathbf{v}(t)|} = \mathcal{O}(k^3).$$

Das schließt den Beweis. □

Proposition 4.16 garantiert einen in $k > 0$ kubischen Konsistenzfehler und motiviert dadurch eine Modifikation des Gleichungssystems (4.15) im θ -Schema Algorithmus 4.6, um auf ein Verfahren, welches zweiter Ordnung exakt in der Zeit ist, zu hoffen. Um Proposition 4.16 verwenden zu können, müssen wir zunächst für gegebenes $\mathbf{m}(t)$ eine variationelle Formulierung finden, die von $\mathbf{v}(t)$ aus (4.30) gelöst wird. Tatsächlich werden wir eine Gleichung formulieren, die von

$$\mathbf{v}(t) = \mathbf{m}_t(t) + \frac{k}{2} \mathcal{P}_{\mathbf{m}(t)} \mathbf{m}_{tt}(t) + \mathcal{O}(k^2) \quad (4.33)$$

gelöst wird. Diese Störung zweiter Ordnung führt jedoch auf keine weiteren Schwierigkeiten: Der Beweis von Proposition 4.16 kann wortgleich für die folgende Proposition 4.17 übernommen werden. Man bemerke, dass die zusätzlichen, in k quadratischen Terme beim Einsetzen von $\mathbf{v}(t)$ in (4.19) mit $\mathcal{O}(k)$ multipliziert werden und deshalb bei der zweiten Gleichheit in (4.32) in $\mathcal{O}(k^3)$ absorbiert werden können.

Proposition 4.17. *Sei $\mathbf{m} \in C^\infty(\overline{\Omega_T})$ mit $|\mathbf{m}| = 1$. Für $t \in [0, T - k]$ sei*

$$\mathbf{v}(t) = \mathbf{m}_t(t) + \frac{k}{2} \mathcal{P}_{\mathbf{m}(t)} \mathbf{m}_{tt}(t) + \mathcal{O}(k^2). \quad (4.34)$$

Dann gilt

$$\frac{\mathbf{m}(t) + k\mathbf{v}(t)}{|\mathbf{m}(t) + k\mathbf{v}(t)|} = \mathbf{m}(t+k) + \mathcal{O}(k^3) \quad \text{für alle } t \in (0, T - k), \quad (4.35)$$

d.h. eine quadratische Störung in $\mathbf{v}(t)$ reduziert die Ordnung des Updates nicht. \square

4.3.3. Neue variationelle Formulierung

Das Ziel lautet nun, eine zu (4.7) analoge Gleichung zu formulieren, die von

$$\mathbf{v}(t) := \mathbf{m}_t(t) + \frac{k}{2} \mathcal{P}_{\mathbf{m}(t)} \mathbf{m}_{tt}(t)$$

gelöst wird. Anschließend können wir die Gleichung analog zu (4.9) diskretisieren, um ein numerisches Verfahren zu erhalten. Zunächst benötigen wir ein wenig Notation.

Für $\boldsymbol{\psi} \in C^\infty(\overline{\Omega})$ definiere

$$\widetilde{\mathbf{h}}_{\text{eff}}(\boldsymbol{\psi}) := C_{\text{ex}} \Delta \boldsymbol{\psi} + \boldsymbol{\pi}(\boldsymbol{\psi}). \quad (4.36)$$

Da $\boldsymbol{\pi}$ ein linearer Operator, und \mathbf{f} konstant in der Zeit ist, gilt für $\boldsymbol{\psi} \in C^\infty(\overline{\Omega_T})$ und alle $t \in [0, T]$

$$\partial_t(\mathbf{h}_{\text{eff}}(\boldsymbol{\psi}(t))) = \widetilde{\mathbf{h}}_{\text{eff}}(\boldsymbol{\psi}_t(t)). \quad (4.37)$$

Nun sind wir bereit, die folgende Gleichheit zu beweisen.

Satz 4.18. Sei $\mathbf{m} \in C^\infty(\overline{\Omega_T})$ eine Lösung von LLG. Sei $t \in [0, T]$. Dann erfüllt

$$\mathbf{v}(t) := \mathbf{m}_t(t) + \frac{k}{2} \mathcal{P}_{\mathbf{m}(t)} \mathbf{m}_{tt}(t) \quad (4.38)$$

für alle $\varphi \in \mathcal{K}(\mathbf{m})$

$$\begin{aligned} & \langle (\alpha + \frac{k}{2} (\mathbf{h}_{\text{eff}}(\mathbf{m}(t)) \cdot \mathbf{m}(t))) \mathbf{v}(t), \varphi \rangle_\Omega + \langle \mathbf{m}(t) \times \mathbf{v}(t), \varphi \rangle_\Omega - \frac{k}{2} \langle \widetilde{\mathbf{h}}_{\text{eff}}(\mathbf{v}(t)), \varphi \rangle_\Omega \\ &= \langle \mathbf{h}_{\text{eff}}(\mathbf{m}(t)), \varphi \rangle_\Omega + k^2 \langle \mathbf{R}_1(t), \varphi \rangle_\Omega, \end{aligned} \quad (4.39)$$

wobei

$$\mathbf{R}_1(t) := \frac{1}{4} (\mathbf{h}_{\text{eff}}(\mathbf{m}(t)) \cdot \mathbf{m}(t)) \mathcal{P}_{\mathbf{m}(t)} \mathbf{m}_{tt}(t) - \frac{1}{4} \widetilde{\mathbf{h}}_{\text{eff}}(\mathcal{P}_{\mathbf{m}(t)} \mathbf{m}_{tt}(t)). \quad (4.40)$$

Beweis. Die alternative Formulierung (4.1) von LLG lautet

$$\alpha \mathbf{m}_t + \mathbf{m} \times \mathbf{m}_t = \mathbf{h}_{\text{eff}}(\mathbf{m}) - (\mathbf{h}_{\text{eff}}(\mathbf{m}) \cdot \mathbf{m}) \mathbf{m}. \quad (4.41)$$

Um die Präsentation kompakt zu halten, verzichten wir im Beweis auf Mitführen der Zeitvariable t als Funktionsargument, d.h. wir schreiben zum Beispiel \mathbf{m} anstelle von $\mathbf{m}(t)$. Wir leiten (4.41) nach der Zeitvariable ab, setzen die Gleichheit (4.37) ein, und erhalten

$$\begin{aligned} \alpha \mathbf{m}_{tt} + \mathbf{m} \times \mathbf{m}_{tt} &= \partial_t (\alpha \mathbf{m}_t + \mathbf{m} \times \mathbf{m}_t) \\ &\stackrel{(4.41)}{=} \partial_t (\mathbf{h}_{\text{eff}}(\mathbf{m}) - (\mathbf{h}_{\text{eff}}(\mathbf{m}) \cdot \mathbf{m}) \mathbf{m}) \\ &\stackrel{(4.37)}{=} \widetilde{\mathbf{h}}_{\text{eff}}(\mathbf{m}_t) - (\widetilde{\mathbf{h}}_{\text{eff}}(\mathbf{m}_t) \cdot \mathbf{m}) \mathbf{m} \\ &\quad - (\mathbf{h}_{\text{eff}}(\mathbf{m}) \cdot \mathbf{m}_t) \mathbf{m} - (\mathbf{h}_{\text{eff}}(\mathbf{m}) \cdot \mathbf{m}) \mathbf{m}_t. \end{aligned} \quad (4.42)$$

Nach der Definition (4.38) von \mathbf{v} gilt

$$\alpha \mathbf{v} + \mathbf{m} \times \mathbf{v} \stackrel{(4.38)}{=} \alpha \mathbf{m}_t + \mathbf{m} \times \mathbf{m}_t + \frac{k}{2} \alpha \mathcal{P}_{\mathbf{m}} \mathbf{m}_{tt} + \frac{k}{2} \mathbf{m} \times \mathcal{P}_{\mathbf{m}} \mathbf{m}_{tt}.$$

Wir verwenden Lemma 4.12(iii) für den ersten Term auf der rechten Seite, Lemma 4.12(v) für den zweiten und vierten Term auf der rechten Seite, sowie Linearität von $\mathcal{P}_{\mathbf{m}}$ für den dritten Term auf der rechten Seite und erhalten

$$\alpha \mathbf{v} + \mathbf{m} \times \mathbf{v} = \mathcal{P}_{\mathbf{m}} \left(\alpha \mathbf{m}_t + \mathbf{m} \times \mathbf{m}_t + \frac{k}{2} \alpha \mathbf{m}_{tt} + \frac{k}{2} \mathbf{m} \times \mathbf{m}_{tt} \right).$$

Einsetzen von (4.41)–(4.42) und Lemma 4.12(ii) zeigen nun

$$\begin{aligned} \alpha \mathbf{v} + \mathbf{m} \times \mathbf{v} &\stackrel{(4.41)}{=} \mathcal{P}_{\mathbf{m}} \left(\mathbf{h}_{\text{eff}}(\mathbf{m}) + \frac{k}{2} \alpha \mathbf{m}_{tt} + \frac{k}{2} \mathbf{m} \times \mathbf{m}_{tt} \right) \\ &\stackrel{(4.42)}{=} \mathcal{P}_{\mathbf{m}} \left(\mathbf{h}_{\text{eff}}(\mathbf{m}) + \frac{k}{2} \widetilde{\mathbf{h}}_{\text{eff}}(\mathbf{m}_t) - \frac{k}{2} (\mathbf{h}_{\text{eff}}(\mathbf{m}) \cdot \mathbf{m}) \mathbf{m}_t \right). \end{aligned}$$

Wir multiplizieren diese Gleichung mit $\varphi \in \mathcal{K}(\mathbf{m})$, integrieren über Ω , verwenden Lemma 4.12(iv) und erhalten

$$\begin{aligned} & \alpha \langle \mathbf{v}, \varphi \rangle_\Omega + \langle \mathbf{m} \times \mathbf{v}, \varphi \rangle_\Omega \\ & \stackrel{\text{(iv)}}{=} \langle \mathbf{h}_{\text{eff}}(\mathbf{m}), \varphi \rangle_\Omega + \frac{k}{2} \langle \widetilde{\mathbf{h}}_{\text{eff}}(\mathbf{m}_t), \varphi \rangle_\Omega - \frac{k}{2} \langle (\mathbf{h}_{\text{eff}}(\mathbf{m}) \cdot \mathbf{m}) \mathbf{m}_t, \varphi \rangle_\Omega. \end{aligned} \quad (4.43)$$

Nach Definition (4.38) von \mathbf{v} gilt $\mathbf{m}_t = \mathbf{v} - \frac{k}{2} \mathcal{P}_m \mathbf{m}_{tt}$. Setzen wir diese Beobachtung in (4.43) ein, so sehen wir

$$\begin{aligned} & \langle (\alpha + \frac{k}{2} (\mathbf{h}_{\text{eff}}(\mathbf{m}) \cdot \mathbf{m})) \mathbf{v}, \varphi \rangle_\Omega + \langle \mathbf{m} \times \mathbf{v}, \varphi \rangle_\Omega - \frac{k}{2} \langle \widetilde{\mathbf{h}}_{\text{eff}}(\mathbf{v}), \varphi \rangle_\Omega \\ & = \langle \mathbf{h}_{\text{eff}}(\mathbf{m}), \varphi \rangle_\Omega + k^2 \langle \mathbf{R}_1, \varphi \rangle_\Omega, \end{aligned}$$

was die Behauptung (4.39) zeigt. \square

4.3.4. Lösbarkeit des Systems

Wir betrachten die variationelle Formulierung (4.39). Einsetzen der Definition (4.36) von $\widetilde{\mathbf{h}}_{\text{eff}}(\mathbf{v})$, partielle Integration und Ausnutzen der Randbedingung (2.1b) führt für $\varphi \in \mathcal{K}(\mathbf{m})$ auf

$$\begin{aligned} & \langle (\alpha + \frac{k}{2} (\mathbf{h}_{\text{eff}}(\mathbf{m}) \cdot \mathbf{m})) \mathbf{v}, \varphi \rangle_\Omega + \langle \mathbf{m} \times \mathbf{v}, \varphi \rangle_\Omega + \frac{k C_{\text{ex}}}{2} \langle \nabla \mathbf{v}, \nabla \varphi \rangle_\Omega - \frac{k}{2} \langle \boldsymbol{\pi}(\mathbf{v}), \varphi \rangle_\Omega \\ & = -C_{\text{ex}} \langle \nabla \mathbf{m}, \nabla \varphi \rangle_\Omega + \langle \boldsymbol{\pi}(\mathbf{m}), \varphi \rangle_\Omega + \langle \mathbf{f}, \varphi \rangle_\Omega + k^2 \langle \mathbf{R}_1, \varphi \rangle_\Omega. \end{aligned} \quad (4.44)$$

Um ein volldiskretes Verfahren zu erhalten, werden wir $\mathcal{K}(\mathbf{m})$ im Ort durch $\mathcal{K}_h(\mathbf{m}_h)$ diskretisieren. Zu gegebenem $\mathbf{m}_h \in \mathcal{M}_h$ erhalten wir dann das Gleichungssystem: Finde $\mathbf{v}_h \in \mathcal{K}_h(\mathbf{m}_h)$, sodass

$$\begin{aligned} & \langle (\alpha + \frac{k}{2} (\mathbf{h}_{\text{eff}}(\mathbf{m}_h) \cdot \mathbf{m}_h)) \mathbf{v}_h, \varphi_h \rangle_\Omega + \langle \mathbf{m}_h \times \mathbf{v}_h, \varphi_h \rangle_\Omega \\ & + \frac{k C_{\text{ex}}}{2} \langle \nabla \mathbf{v}_h, \nabla \varphi_h \rangle_\Omega - \frac{k}{2} \langle \boldsymbol{\pi}(\mathbf{v}_h), \varphi_h \rangle_\Omega \\ & = -C_{\text{ex}} \langle \nabla \mathbf{m}_h, \nabla \varphi_h \rangle_\Omega + \langle \boldsymbol{\pi}_h(\mathbf{m}_h), \varphi_h \rangle_\Omega + \langle \mathbf{f}_h, \varphi_h \rangle_\Omega + k^2 \langle \mathbf{R}_{1h}, \varphi_h \rangle_\Omega \end{aligned} \quad (4.45)$$

für alle $\varphi_h \in \mathcal{K}_h(\mathbf{m}_h)$. $\mathbf{R}_{1h} \in \mathbf{V}_h$ bezeichnet eine Diskretisierung von \mathbf{R}_1 , siehe (4.40), deren Definition wir später in Kapitel 4.3.6 angeben. Anders als für das System (4.15) beim klassischen Tangent-Plane-Algorithmus, ist die eindeutige Lösbarkeit dieses Gleichungssystems nicht garantiert: Während beim Standard Tangent-Plane-Integrator (Algorithmus 4.6) die Masse-Matrix lediglich mit $\alpha > 0$ gewichtet wird, haben wir hier die lokale Gewichtung $\alpha + \frac{k}{2} (\mathbf{h}_{\text{eff}}(\mathbf{m}_h) \cdot \mathbf{m}_h)$, welche im Allgemeinen auch nicht-positive Werte annehmen kann. Die Koerzivität der linken Seite ist also *a priori* nicht gegeben.

Abhilfe verschaffen wir uns, indem wir Gleichung (4.44) weiter modifizieren, sodass die im Diskreten resultierende Masse-Matrix elliptisch ist: Wir ersetzen in (4.44) die lokale Gewichtung des Masse-Terms

$$\langle (\alpha + \frac{k}{2} (\mathbf{h}_{\text{eff}}(\mathbf{m}) \cdot \mathbf{m})) \mathbf{v}, \varphi \rangle_\Omega \rightsquigarrow \langle \omega(\mathbf{m}) \mathbf{v}, \varphi \rangle_\Omega \quad (4.46)$$

mit einer Gewichtsfunktion ω , welche strikt von Null weg beschränkt ist, d.h., es existiert ein positives $\omega_0 \in \mathbb{R}$, sodass $\omega(\cdot) \geq \omega_0 > 0$. Konkret definieren wir diese Gewichtung folgendermaßen.

Definition 4.19. Sei $0 < \alpha \leq 1$ und sei $M: \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}^+$ so, dass

$$kM(k) \rightarrow 0 \quad \text{für } k \rightarrow 0, \quad (4.47a)$$

$$k \mapsto kM(k) \quad \text{monoton wachsend ist und} \quad (4.47b)$$

$$k \mapsto M(k) \quad \text{monoton fallend ist.} \quad (4.47c)$$

Für $k > 0$ definiere

$$\tilde{\omega}_{M,k}(x) := \begin{cases} \alpha + \frac{k}{2} \min\{x, M(k)\} & \text{für } x \geq 0, \\ \frac{\alpha}{1 + \frac{k}{2\alpha} \min\{-x, M(k)\}} & \text{für } x < 0. \end{cases} \quad (4.48)$$

für $x \in \mathbb{R}$.

Lemma 4.20. Die Funktion $M: \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}^+$ erfülle die Voraussetzungen von Definition 4.19. Sei $k_0 > 0$. Dann gilt für alle $k \leq k_0$

$$\tilde{\omega}_{M,k}(x) \geq \omega_0 := \tilde{\omega}_{M,k_0}(-M(k_0)) = \frac{\alpha}{1 + \frac{k_0}{2\alpha} M(k_0)} > 0 \quad \text{für alle } x \in \mathbb{R}. \quad (4.49)$$

Beweis. Seien $k \leq k_0$ und $x \in \mathbb{R}$ beliebig. Aus (4.47b) folgt $k_0 M(k_0) \geq kM(k)$. Für $x < 0$ sehen wir

$$\tilde{\omega}_{M,k}(x) = \frac{\alpha}{1 + \frac{k}{2\alpha} \min\{-x, M(k)\}} \geq \frac{\alpha}{1 + \frac{k}{2\alpha} M(k)} \geq \frac{\alpha}{1 + \frac{k_0}{2\alpha} M(k_0)} = \tilde{\omega}_{M,k_0}(-M(k_0)).$$

Für $x \geq 0$ gilt

$$\tilde{\omega}_{M,k}(x) = \alpha + \frac{k}{2} \min\{x, M(k)\} \geq \alpha \geq \frac{\alpha}{1 + \frac{k_0}{2\alpha} M(k_0)} = \tilde{\omega}_{M,k_0}(-M(k_0)).$$

Die Positivität von $\tilde{\omega}_{M,k_0}(-M(k_0))$ folgt aus $\alpha > 0$. □

In den folgenden zwei Lemmas analysieren wir die durch Einführen dieser Gewichtung bedingte Störung des Systems (4.45).

Lemma 4.21. Die Funktion $M: \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}^+$ erfülle die Voraussetzungen von Definition 4.19. Sei $\tilde{\omega}_{M,k}$ definiert wie in (4.48). Wähle $k_0 > 0$ so, dass $k_0 M(k_0) \leq \alpha$. Dann gilt für alle $k \leq k_0$ und alle $x \in [-M(k_0), M(k_0)]$

$$\left| \alpha + \frac{k}{2} x - \tilde{\omega}_{M,k}(x) \right| \leq Ck^2, \quad (4.50)$$

mit der von k unabhängigen Konstante $C = M(k_0)^2 / (2\alpha) > 0$.

Beweis. Nach Voraussetzung (4.47a) ist es möglich $k_0 > 0$ so zu wählen, dass $k_0 M(k_0) \leq \alpha$. Wir erinnern daran, dass $M(k_0) \leq M(k)$ nach Voraussetzung (4.47c).

Nach der Definition (4.48) von $\tilde{\omega}_{M,k}$ verschwindet für $0 \leq x \leq M(k_0) \leq M(k)$ die Differenz auf der linken Seite von (4.50) und die Behauptung folgt sofort.

Differenzieren nach x zeigt, dass für $x \in [-M(k_0), 0) \subseteq [-M(k), 0)$ und $j \in \mathbb{N}$ die Formel

$$\tilde{\omega}_{M,k}^{(j)}(x) = \frac{2\alpha^2 k^j j!}{(2\alpha - kx)^{1+j}}$$

gilt. Nach Voraussetzung gilt

$$\left| \frac{kx}{2\alpha} \right| \leq \frac{kM(k_0)}{2\alpha} \leq \frac{k_0 M(k_0)}{2\alpha} \leq \frac{1}{2} < 1.$$

Nun zeigt eine Taylor-Entwicklung um $x = 0$ und Auflösen der geometrischen Reihe durch die Formel $\sum_{j=0}^{\infty} q^j = 1/(1-q)$ für $|q| < 1$, dass

$$\begin{aligned} \tilde{\omega}_{M,k}(x) &= \alpha + \frac{k}{2}x + \sum_{j=2}^{\infty} \frac{k^j x^j}{2^j \alpha^{j-1}} = \alpha + \frac{k}{2}x + \frac{k^2 x^2}{4\alpha} \sum_{j=0}^{\infty} \left(\frac{kx}{2\alpha}\right)^j \\ &= \alpha + \frac{k}{2}x + \frac{k^2 x^2}{4\alpha} \frac{2\alpha}{2\alpha - kx} \\ &= \alpha + \frac{k}{2}x + \frac{x^2}{4\alpha - 2kx} k^2. \end{aligned} \tag{4.51}$$

Mit dieser Identität (4.51), der Voraussetzung (4.47b), der Wahl von k_0 , sodass $k_0 M(k_0) \leq \alpha$ und wegen $|x| \leq M(k_0)$ gilt nun

$$\begin{aligned} \left| \alpha + \frac{k}{2}x - \tilde{\omega}_{M,k}(x) \right| &\stackrel{(4.51)}{=} \frac{x^2}{4\alpha - 2kx} k^2 \leq \frac{x^2}{4\alpha - 2kM(k_0)} k^2 \leq \frac{x^2}{4\alpha - 2k_0 M(k_0)} k^2 \\ &\leq \frac{x^2}{2\alpha} k^2 \leq \frac{M(k_0)^2}{2\alpha} k^2 = Ck^2, \end{aligned}$$

mit $C = M(k_0)^2/(2\alpha)$. □

Lemma 4.22. Die Funktion $M: \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}^+$ erfülle die Voraussetzungen von Definition 4.19. Dann gilt für die Gewichtsfunktion $\tilde{\omega}_{M,k}$ aus (4.48)

$$|\tilde{\omega}_{M,k}(x) - \alpha| \leq \frac{kM(k)}{2} \quad \text{für alle } x \in \mathbb{R}. \tag{4.52}$$

Beweis. Die Abschätzung folgt direkt aus der Definition (4.48) von $\tilde{\omega}_{M,k}(\cdot)$. Für $x \geq 0$ gilt

$$|\tilde{\omega}_{M,k}(x) - \alpha| = \frac{k}{2} |\min\{x, M(k)\}| \leq \frac{kM(k)}{2}.$$

Für $x < 0$ lautet die Rechnung

$$|\tilde{\omega}_{M,k}(x) - \alpha| = \left| \frac{\alpha}{1 + \frac{k}{2\alpha} \min\{-x, M(k)\}} - \alpha \right| = \left| \frac{\alpha - \alpha - \frac{k}{2} \min\{-x, M(k)\}}{1 + \frac{k}{2\alpha} \min\{-x, M(k)\}} \right| \leq \frac{kM(k)}{2}.$$

Durch die Fallunterscheidung ist die Behauptung gezeigt. □

Definition 4.23. Im Fall $\mathbf{m} \in C^\infty(\overline{\Omega_T})$ wählen wir für $M: \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}^+$ die konstante Abbildung $M: k \mapsto \|\mathbf{h}_{\text{eff}}(\mathbf{m}) \cdot \mathbf{m}\|_{L^\infty(\Omega_T)}$. Weiter definieren wir zu gegebener Abbildung $M: \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}^+$ und gegebenen $k_0 \geq k > 0$ die lokale Gewichtsfunktion

$$\omega_{M,k}(\mathbf{m}) := \tilde{\omega}_{M,k}(\mathbf{h}_{\text{eff}}(\mathbf{m}) \cdot \mathbf{m}), \quad (4.53)$$

welche nach Lemma 4.20 die Abschätzung

$$\omega_{M,k}(\mathbf{m}) \geq \omega_0 := \alpha / (1 + k_0 M(k_0) / (2\alpha)) > 0$$

erfüllt.

Satz 4.24. Sei $\mathbf{m} \in C^\infty(\overline{\Omega_T})$ eine Lösung von LLG. Definiere $\omega_{M,k}$ entsprechend Definition 4.23. Sei $t \in [0, T]$. Dann erfüllt

$$\mathbf{v}(t) := \mathbf{m}_t(t) + \frac{k}{2} \mathcal{P}_{\mathbf{m}(t)} \mathbf{m}_{tt}(t) \quad (4.54)$$

für alle $\varphi \in \mathcal{K}(\mathbf{m})$

$$\begin{aligned} & \langle \omega_{M,k}(\mathbf{m}(t)) \mathbf{v}(t), \varphi \rangle_\Omega + \langle \mathbf{m}(t) \times \mathbf{v}(t), \varphi \rangle_\Omega - \frac{k}{2} \langle \widetilde{\mathbf{h}_{\text{eff}}}(\mathbf{v}(t)), \varphi \rangle_\Omega \\ & = \langle \mathbf{h}_{\text{eff}}(\mathbf{m}(t)), \varphi \rangle_\Omega + k^2 \langle \mathbf{R}_1(t), \varphi \rangle_\Omega + k^2 \langle \mathbf{R}_2(t), \varphi \rangle_\Omega + k^3 \langle \mathbf{R}_3(t), \varphi \rangle_\Omega, \end{aligned} \quad (4.55)$$

wobei \mathbf{R}_2 und \mathbf{R}_3 beschränkte Funktionen auf Ω_T bezeichnen, welche die Abschätzungen

$$\|\mathbf{R}_2\|_{L^\infty(\Omega_T)} \leq \frac{1}{2\alpha} \|\mathbf{h}_{\text{eff}}(\mathbf{m}) \cdot \mathbf{m}\|_{L^\infty(\Omega_T)}^2 \|\mathbf{m}_t\|_{L^\infty(\Omega_T)} \quad (4.56)$$

sowie

$$\|\mathbf{R}_3\|_{L^\infty(\Omega_T)} \leq \frac{1}{4\alpha} \|\mathbf{h}_{\text{eff}}(\mathbf{m}) \cdot \mathbf{m}\|_{L^\infty(\Omega_T)}^2 \|\mathcal{P}_{\mathbf{m}} \mathbf{m}_{tt}\|_{L^\infty(\Omega_T)} \quad (4.57)$$

erfüllen.

Beweis. Um die Präsentation kompakt zu halten, verzichten wir im Beweis auf Mitführen der Zeitvariable t als Funktionsargument, d.h. wir schreiben zum Beispiel \mathbf{m} anstelle von $\mathbf{m}(t)$. Nach Satz 4.18 erfüllt \mathbf{v} die Gleichung

$$\begin{aligned} & \langle (\alpha + \frac{k}{2} (\mathbf{h}_{\text{eff}}(\mathbf{m}) \cdot \mathbf{m})) \mathbf{v}, \varphi \rangle_\Omega + \langle \mathbf{m} \times \mathbf{v}, \varphi \rangle_\Omega - \frac{k}{2} \langle \widetilde{\mathbf{h}_{\text{eff}}}(\mathbf{v}), \varphi \rangle_\Omega \\ & = \langle \mathbf{h}_{\text{eff}}(\mathbf{m}), \varphi \rangle_\Omega + k^2 \langle \mathbf{R}_1, \varphi \rangle_\Omega. \end{aligned} \quad (4.58)$$

Wir erweitern um die Gewichtsfunktion:

$$\begin{aligned} (\alpha + \frac{k}{2} (\mathbf{h}_{\text{eff}}(\mathbf{m}) \cdot \mathbf{m})) \mathbf{v} & = \omega_{M,k}(\mathbf{m}) \mathbf{v} + (\alpha + \frac{k}{2} (\mathbf{h}_{\text{eff}}(\mathbf{m}) \cdot \mathbf{m}) - \omega_{M,k}(\mathbf{m})) \mathbf{v} \\ & \stackrel{(4.54)}{=} \omega_{M,k}(\mathbf{m}) \mathbf{v} + (\alpha + \frac{k}{2} (\mathbf{h}_{\text{eff}}(\mathbf{m}) \cdot \mathbf{m}) - \omega_{M,k}(\mathbf{m})) (\mathbf{m}_t + \frac{k}{2} \mathcal{P}_{\mathbf{m}} \mathbf{m}_{tt}). \end{aligned}$$

Schließlich erhalten wir

$$(\alpha + \frac{k}{2}(\mathbf{h}_{\text{eff}}(\mathbf{m}) \cdot \mathbf{m}))\mathbf{v} = \omega_{M,k}(\mathbf{m})\mathbf{v} + \mathbf{R}_2 + k\mathbf{R}_3, \quad (4.59)$$

mit

$$\mathbf{R}_2 := (\alpha + \frac{k}{2}(\mathbf{h}_{\text{eff}}(\mathbf{m}) \cdot \mathbf{m}) - \omega_{M,k}(\mathbf{m}))\mathbf{m}_t \quad (4.60)$$

und

$$\mathbf{R}_3 := \frac{1}{2}(\alpha + \frac{k}{2}(\mathbf{h}_{\text{eff}}(\mathbf{m}) \cdot \mathbf{m}) - \omega_{M,k}(\mathbf{m}))\mathcal{P}_{\mathbf{m}}\mathbf{m}_{tt}. \quad (4.61)$$

Die Abschätzungen (4.56)–(4.57) folgen aus Lemma 4.21. Gleichung (4.55) folgt durch Einsetzen von (4.59) in (4.58). \square

Bemerkung 4.25. Wenn wir $\mathbf{m} \in \mathbf{C}^\infty(\overline{\Omega_T})$ annehmen, dann ist $\|\mathbf{h}_{\text{eff}}(\mathbf{m}) \cdot \mathbf{m}\|_{\mathbf{L}^\infty(\Omega_T)}$ endlich und wir wählen $M: \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}^+$ konstant wie in Definition 4.23.

(i) Damit folgt aus Lemma 4.21, dass sich die Störung des Systems (4.44) durch die Modifikation (4.46) für $k \rightarrow 0$ asymptotisch wie $\mathcal{O}(k^2)$ verhält.

(ii) Lemma 4.22 impliziert die Konvergenz $\omega_{M,k}(\cdot) \rightarrow \alpha$ für $k \rightarrow 0$, welche wir später in Kapitel 5.2 im Konvergenzbeweis von Theorem 5.1 benötigen werden.

(iii) In einem volldiskreten Verfahren wäre die entsprechende Wahl von $M: \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}^+$ in Definition 4.23

$$M: k \mapsto \limsup_{h,k \rightarrow 0} \max_{0 \leq n \leq N} \|\mathbf{h}_{\text{eff}}(\mathbf{m}_h^n) \cdot \mathbf{m}_h^n\|_{\mathbf{L}^\infty(\Omega)}. \quad (4.62)$$

Selbst wenn dieser Wert endlich ist, ist er a priori nicht bekannt. Eine Strategie diese Schwierigkeit zu umgehen, wird in Kapitel 5.3 besprochen.

4.3.5. Stabilisierung und CFL-Bedingung

Beim θ -Schema Algorithmus 4.6 mit der Wahl $\theta = 1/2$ haben wir für die Konvergenz des Outputs die CFL-Bedingung $k = \mathbf{o}(h)$ gefordert, siehe Theorem 4.8. Unsere Wahl von \mathbf{v} in (4.30) entspricht der Mittelpunkregel $\theta = 1/2$. Kanonisch würde man nun dieselbe CFL-Bedingung $k = \mathbf{o}(h)$ an die Diskretisierungsparameter $k, h > 0$ fordern, jedoch wird in [AKST14] eine Idee vorgestellt, diese Forderung zu vermeiden. Um ein unbedingt konvergentes Verfahren zu erhalten, führen wir die Stabilisierung

$$\frac{kC_{\text{ex}}}{2}\langle \nabla \mathbf{v}, \nabla \varphi \rangle_\Omega \rightsquigarrow \frac{kC_{\text{ex}}}{2}(1 + \rho(k))\langle \nabla \mathbf{v}, \nabla \varphi \rangle_\Omega \quad (4.63)$$

ein. Hier bezeichnet $\rho: \mathbb{R}_{>0} \rightarrow \mathbb{R}_{\geq 0}$ eine Funktion mit $\rho(k) \rightarrow 0$ für $k \rightarrow 0$. Diese Modifikation im Steifigkeitsterm führt zu folgender Gleichung.

Satz 4.26. Sei $\mathbf{m} \in \mathbf{C}^\infty(\overline{\Omega_T})$ eine Lösung von LLG. Sei $t \in [0, T]$. Dann erfüllt

$$\mathbf{v}(t) := \mathbf{m}_t(t) + \frac{k}{2}\mathcal{P}_{\mathbf{m}(t)}\mathbf{m}_{tt}(t) \quad (4.64)$$

für alle $\varphi \in \mathcal{K}(\mathbf{m})$

$$\begin{aligned}
 & \langle \omega_{M,k}(\mathbf{m}(t))\mathbf{v}(t), \varphi \rangle_{\Omega} + \langle \mathbf{m}(t) \times \mathbf{v}(t), \varphi \rangle_{\Omega} \\
 & \quad + \frac{C_{\text{ex}}k}{2}(1 + \rho(k))\langle \nabla \mathbf{v}(t), \nabla \varphi \rangle_{\Omega} - \frac{k}{2}\langle \boldsymbol{\pi}(\mathbf{v}(t)), \varphi \rangle_{\Omega} \\
 & = \langle \mathbf{h}_{\text{eff}}(\mathbf{m}(t)), \varphi \rangle_{\Omega} + k^2\langle \mathbf{R}_1(t), \varphi \rangle_{\Omega} + k^2\langle \mathbf{R}_2(t), \varphi \rangle_{\Omega} + k^3\langle \mathbf{R}_3(t), \varphi \rangle_{\Omega} \\
 & \quad + k\rho(k)\langle \nabla \mathbf{R}_4(t), \nabla \varphi \rangle_{\Omega} + k^2\rho(k)\langle \nabla \mathbf{R}_5(t), \nabla \varphi \rangle_{\Omega} + k^2\langle \partial_n \mathbf{R}_5(t), \varphi \rangle_{\partial\Omega},
 \end{aligned} \tag{4.65}$$

mit den auf $\Omega \times [0, T]$ definierten Funktionen

$$\mathbf{R}_4(t) := \frac{C_{\text{ex}}}{2}\mathbf{m}_t(t) \tag{4.66}$$

und

$$\mathbf{R}_5(t) := \frac{C_{\text{ex}}}{4}\mathcal{P}_{\mathbf{m}(t)}\mathbf{m}_{tt}(t). \tag{4.67}$$

Beweis. Um die Präsentation kompakt zu halten, verzichten wir im Beweis auf Mitführen der Zeitvariable t als Funktionsargument, d.h. wir schreiben zum Beispiel \mathbf{m} anstelle von $\mathbf{m}(t)$. Nach Satz 4.24 erfüllt \mathbf{v} die Gleichung

$$\begin{aligned}
 & \langle \omega_{M,k}(\mathbf{m})\mathbf{v}, \varphi \rangle_{\Omega} + \langle \mathbf{m} \times \mathbf{v}, \varphi \rangle_{\Omega} - \frac{k}{2}\langle \widetilde{\mathbf{h}}_{\text{eff}}(\mathbf{v}), \varphi \rangle_{\Omega} \\
 & = \langle \mathbf{h}_{\text{eff}}(\mathbf{m}), \varphi \rangle_{\Omega} + k^2\langle \mathbf{R}_1, \varphi \rangle_{\Omega} + k^2\langle \mathbf{R}_2, \varphi \rangle_{\Omega} + k^3\langle \mathbf{R}_3, \varphi \rangle_{\Omega},
 \end{aligned} \tag{4.68}$$

Für den dritten Term auf der linken Seite liefert partielle Integration im Ort

$$\begin{aligned}
 \langle \widetilde{\mathbf{h}}_{\text{eff}}(\mathbf{v}), \varphi \rangle_{\Omega} & \stackrel{(4.36)}{=} -C_{\text{ex}}\langle \nabla \mathbf{v}, \nabla \varphi \rangle_{\Omega} + \langle \boldsymbol{\pi}(\mathbf{v}), \varphi \rangle_{\Omega} + C_{\text{ex}}\langle \partial_n \mathbf{v}, \varphi \rangle_{\partial\Omega} \\
 & \stackrel{(4.64)}{=} -C_{\text{ex}}\langle \nabla \mathbf{v}, \nabla \varphi \rangle_{\Omega} + \langle \boldsymbol{\pi}(\mathbf{v}), \varphi \rangle_{\Omega} \\
 & \quad + C_{\text{ex}}\langle \partial_n \mathbf{m}_t, \varphi \rangle_{\partial\Omega} + \frac{k}{2}C_{\text{ex}}\langle \partial_n \mathcal{P}_{\mathbf{m}}\mathbf{m}_{tt}, \varphi \rangle_{\partial\Omega} \\
 & \stackrel{(2.1b)}{=} -C_{\text{ex}}\langle \nabla \mathbf{v}, \nabla \varphi \rangle_{\Omega} + \langle \boldsymbol{\pi}(\mathbf{v}), \varphi \rangle_{\Omega} + \frac{k}{2}C_{\text{ex}}\langle \partial_n \mathcal{P}_{\mathbf{m}}\mathbf{m}_{tt}, \varphi \rangle_{\partial\Omega} \\
 & \stackrel{(4.67)}{=} -C_{\text{ex}}\langle \nabla \mathbf{v}, \nabla \varphi \rangle_{\Omega} + \langle \boldsymbol{\pi}(\mathbf{v}), \varphi \rangle_{\Omega} + 2k\langle \partial_n \mathbf{R}_5, \varphi \rangle_{\partial\Omega}
 \end{aligned} \tag{4.69}$$

Wir erweitern um die Stabilisierungsfunktion $\rho: \mathbb{R}_{>0} \rightarrow \mathbb{R}_{\geq 0}$ und erhalten mit \mathbf{R}_4 und \mathbf{R}_5 definiert wie in (4.66)–(4.67)

$$\begin{aligned}
 \frac{C_{\text{ex}}}{2}\nabla \mathbf{v} & = \frac{C_{\text{ex}}}{2}(1 + \rho(k))\nabla \mathbf{v} - \frac{C_{\text{ex}}}{2}\rho(k)\nabla \mathbf{v} \\
 & \stackrel{(4.64)}{=} \frac{C_{\text{ex}}}{2}(1 + \rho(k))\nabla \mathbf{v} - \frac{C_{\text{ex}}}{2}\rho(k)\nabla(\mathbf{m}_t + \frac{k}{2}\mathcal{P}_{\mathbf{m}}\mathbf{m}_{tt}) \\
 & = \frac{C_{\text{ex}}}{2}(1 + \rho(k))\nabla \mathbf{v} - \rho(k)\nabla \mathbf{R}_4 - k\rho(k)\nabla \mathbf{R}_5.
 \end{aligned} \tag{4.70}$$

Wenn wir nun (4.69)–(4.70) in Gleichung (4.68) einsetzen, erhalten wir die Behauptung (4.65). \square

Bemerkung 4.27. (i) Falls $\rho(k) > 0$ zumindest linear in k fällt, d.h., $\rho(k) = \mathbf{o}(k)$, dann gilt $k\rho(k) = \mathcal{O}(k^2)$ und nach (4.65) ist damit die Störung der Gleichung quadratisch in k . (ii) Wir haben die Stabilisierung eingeführt, um später im Konvergenzbeweis von Theorem 5.1 auf eine CFL-Bedingung verzichten zu können. In Kapitel 5.3 werden wir besprechen, wie $\rho(\cdot)$ zu wählen ist, sodass unbedingte Konvergenz des Integrators folgt.

4.3.6. Algorithmus

Wir wollen (4.65) umschreiben, sodass die vorkommenden Terme für $\mathbf{m}, \mathbf{v}, \boldsymbol{\varphi} \in \mathbf{H}^1(\Omega)$ sinnvoll definiert sind. Dazu setzen wir die Definition (2.2) von $\mathbf{h}_{\text{eff}}(\mathbf{m})$ ein und integrieren partiell im Ort. Dies ergibt

$$\langle \mathbf{h}_{\text{eff}}(\mathbf{m}), \boldsymbol{\varphi} \rangle_{\Omega} = -C_{\text{ex}} \langle \nabla \mathbf{m}, \nabla \boldsymbol{\varphi} \rangle_{\Omega} + \langle \boldsymbol{\pi}(\mathbf{m}), \boldsymbol{\varphi} \rangle_{\Omega} + \langle \mathbf{f}, \boldsymbol{\varphi} \rangle_{\Omega}.$$

Die Randterme verschwinden aufgrund der Neumann-Randbedingung $\partial_n \mathbf{m} = 0$ auf $\partial\Omega$, vgl. (2.1b). Setzen wir diese Gleichheit nun in (4.65) ein, erhalten wir die Gleichung

$$\begin{aligned} & \langle \omega_{M,k}(\mathbf{m}(t))\mathbf{v}(t), \boldsymbol{\varphi} \rangle_{\Omega} + \langle \mathbf{m}(t) \times \mathbf{v}(t), \boldsymbol{\varphi} \rangle_{\Omega} \\ & + \frac{C_{\text{ex}}k}{2}(1 + \rho(k)) \langle \nabla \mathbf{v}(t), \nabla \boldsymbol{\varphi} \rangle_{\Omega} - \frac{k}{2} \langle \boldsymbol{\pi}(\mathbf{v}(t)), \boldsymbol{\varphi} \rangle_{\Omega} \\ & = -C_{\text{ex}} \langle \nabla \mathbf{m}, \nabla \boldsymbol{\varphi} \rangle_{\Omega} + \langle \boldsymbol{\pi}(\mathbf{m}), \boldsymbol{\varphi} \rangle_{\Omega} + \langle \mathbf{f}, \boldsymbol{\varphi} \rangle_{\Omega} \\ & + k^2 \langle \mathbf{R}_1(t), \boldsymbol{\varphi} \rangle_{\Omega} + k^2 \langle \mathbf{R}_2(t), \boldsymbol{\varphi} \rangle_{\Omega} + k^3 \langle \mathbf{R}_3(t), \boldsymbol{\varphi} \rangle_{\Omega} \\ & + k\rho(k) \langle \nabla \mathbf{R}_4(t), \nabla \boldsymbol{\varphi} \rangle_{\Omega} + k^2 \rho(k) \langle \nabla \mathbf{R}_5(t), \nabla \boldsymbol{\varphi} \rangle_{\Omega} + k^2 \langle \partial_n \mathbf{R}_5(t), \boldsymbol{\varphi} \rangle_{\partial\Omega}. \end{aligned} \quad (4.71)$$

Um den in [AKST14] vorgestellten Tangent-Plane-Integrator zu erhalten, diskretisieren wir $\mathcal{K}(\mathbf{m})$ in Gleichung (4.65) im Ort durch $\mathcal{K}_h(\mathbf{m}_h)$. Die Störungen in der rechten Seite approximieren wir im Diskreten durch $\mathbf{0} \in \mathcal{K}_h(\mathbf{m}_h)$, d.h. wir wählen $\mathbf{R}_{1h} := \mathbf{R}_{2h} := \mathbf{R}_{3h} := \mathbf{R}_{4h} := \mathbf{R}_{5h} := \mathbf{0}$.

Algorithmus 4.28 ([AKST14, Algorithmus 2], (Almost) second-order tangent plane scheme). **Input:** M wie in (4.47), ρ wie in (4.63), $N \in \mathbb{N}$, Zeitschrittweite $k = T/N > 0$, Approximation $\mathbf{m}_h^0 \in \mathcal{M}_h$ des Anfangsdatums \mathbf{m}^0 .

Loop: Für $n = 0, 1, \dots, N-1$ iteriere die folgenden Schritte (a)–(b):

(a) Finde $\mathbf{v}_h^n \in \mathcal{K}_h(\mathbf{m}_h^n)$, sodass für alle $\boldsymbol{\varphi}_h \in \mathcal{K}_h(\mathbf{m}_h^n)$

$$\begin{aligned} & \langle \omega_{M,k}(\mathbf{m}_h^n)\mathbf{v}_h^n, \boldsymbol{\varphi}_h \rangle_{\Omega} + \langle \mathbf{m}_h^n \times \mathbf{v}_h^n, \boldsymbol{\varphi}_h \rangle_{\Omega} \\ & + \frac{C_{\text{ex}}k}{2}(1 + \rho(k)) \langle \nabla \mathbf{v}_h^n, \nabla \boldsymbol{\varphi}_h \rangle_{\Omega} - \frac{k}{2} \langle \boldsymbol{\pi}_h(\mathbf{v}_h^n), \boldsymbol{\varphi}_h \rangle_{\Omega} \\ & = -C_{\text{ex}} \langle \nabla \mathbf{m}_h^n, \nabla \boldsymbol{\varphi}_h \rangle_{\Omega} + \langle \boldsymbol{\pi}_h(\mathbf{m}_h^n), \boldsymbol{\varphi}_h \rangle_{\Omega} + \langle \mathbf{f}_h, \boldsymbol{\varphi}_h \rangle_{\Omega}. \end{aligned} \quad (4.72)$$

(b) Definiere $\mathbf{m}_h^{n+1} \in \mathcal{M}_h$ durch

$$\mathbf{m}_h^{n+1}(z_h) := \frac{\mathbf{m}_h^n(z_h) + k\mathbf{v}_h^n(z_h)}{|\mathbf{m}_h^n(z_h) + k\mathbf{v}_h^n(z_h)|} \quad \text{für alle } z_h \in \mathcal{N}_h. \quad (4.73)$$

Output: Approximationen $\mathbf{m}_h^n \approx \mathbf{m}(nT/N)$ für alle $n = 0, \dots, N$.

Theorem 4.29. Sei $\pi_h: \mathbf{V}_h \rightarrow \mathbf{L}^2(\Omega)$ stabil, d.h. es gelte $\|\pi_h(\varphi_h)\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)} \leq \tilde{C}_\pi \|\varphi_h\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)}$ für alle $\varphi_h \in \mathbf{V}_h$ mit der von $h > 0$ unabhängigen Konstante $\tilde{C}_\pi > 0$. Weiter sei $k_0 \leq 2\alpha/(3\tilde{C}_\pi)$ so, dass $k_0 M(k_0) \leq \alpha$. Dann ist Algorithmus 4.28 für alle $k \leq k_0$ wohldefiniert, d.h. Gleichung (4.72) ist in jedem Schritt eindeutig lösbar und der Nenner in (4.73) ist positiv für alle $n = 0, 1, \dots, N-1$.

Beweis. Für alle $\mathbf{m}_h^n \in \mathcal{M}_h$ kann die linke Seite in (4.72) als $a(\mathbf{m}_h^n; \mathbf{v}_h, \varphi_h)$ mit der Bilinearform

$$\begin{aligned} a(\mathbf{m}_h; \psi_h, \varphi_h) &:= \langle \omega_{M,k}(\mathbf{m}_h) \psi_h, \varphi_h \rangle_\Omega + \langle \mathbf{m}_h \times \psi_h, \varphi_h \rangle_\Omega \\ &\quad + \frac{C_{\text{ex}} k (1 + \rho(k))}{2} \langle \nabla \psi_h, \nabla \varphi_h \rangle_\Omega - \frac{k}{2} \langle \pi_h(\psi_h), \varphi_h \rangle_\Omega \end{aligned}$$

geschrieben werden. Die Bilinearform ist elliptisch auf $\mathcal{K}_h(\mathbf{m}_h)$, da

$$a(\mathbf{m}_h; \varphi_h, \varphi_h) \geq \left(\omega_0 - \frac{\tilde{C}_\pi k}{2} \right) \|\varphi_h\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)}^2 + \frac{C_{\text{ex}} k}{2} \|\nabla \varphi_h\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)}^2 \quad \text{für alle } \varphi_h \in \mathcal{K}_h(\mathbf{m}_h)$$

und nach Wahl von k_0

$$\omega_0 - \frac{\tilde{C}_\pi k}{2} \stackrel{(4.49)}{=} \frac{\alpha}{1 + \frac{k_0 M(k_0)}{2\alpha}} - \frac{\tilde{C}_\pi k}{2} \geq \frac{2\alpha}{3} - \frac{\tilde{C}_\pi k_0}{2} \geq \frac{2\alpha}{3} - \frac{\alpha}{3} = \frac{\alpha}{3} > 0.$$

Die eindeutige Lösbarkeit folgt nun aus dem Lemma von Lax–Milgram (Lemma A.1). Der Nenner in (4.73) ist stets positiv, insbesondere sogar ≥ 1 , da $\mathbf{v}_h^n \in \mathcal{K}_h(\mathbf{m}_h^n)$ gilt, siehe Lemma 3.4. Diese Beobachtung schließt den Beweis. \square

Bemerkung 4.30. Dieser Algorithmus ist nicht für beliebiges $k > 0$ wohldefiniert, vgl. Theorem 4.29. Das ist ein Nachteil im Vergleich zu Algorithmus 4.6, vgl. Theorem 4.7. Die entscheidende Verbesserung von Algorithmus 4.28 gegenüber dem Standard-Tangent-Plane-Integrator (Algorithmus 4.6) ist der in $k > 0$ kubische Konsistenzfehler des Verfahrens, vgl. Proposition 4.15 bzw. Proposition 4.16. Folglich kann man auf ein zweiter Ordnung in der Zeit exaktes Verfahren hoffen. Der Preis für den verbesserten Konsistenzfehler ist, dass in der Praxis ein iterativer Löser zum Berechnen der Lösung \mathbf{v}_h^n von (4.72) notwendig ist: Die Gleichung ist zwar linear in \mathbf{v}_h^n , jedoch ist das resultierende lineare Gleichungssystem voll besetzt, da $\mathbf{h}_{s,h}$ ein nichtlokaler Operator ist (vgl. Kapitel 2.2.2). In der Praxis verwendet man deshalb meist eine Fixpunktiteration zur Berechnung von \mathbf{v}_h^n . Abhilfe verschafft die Idee $\pi_h(\mathbf{v}_h)$ geeignet durch ein explizites Zweischrittverfahren zu approximieren. Dieses Vorgehen analysieren wir in Kapitel 4.4.

4.4. Effizienter Tangent-Plane-Integrator, zweite Ordnung in der Zeit

4.4.1. Motivation

Betrachte die Gleichung (4.72) zur Berechnung der Unbekannten $\mathbf{v}_h^n \in \mathcal{K}_h(\mathbf{m}_h^n)$ in Algorithmus 4.28. Wie für Finite-Element-Methoden üblich, schreibt man dieses Finite-Element-Gleichungssystem als lineares Gleichungssystem $\mathbf{B}\mathbf{x} = \mathbf{b}$ mit einer Matrix $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{3N \times 3N}$

und rechter Seite $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^{3N}$. Die Unbekannte $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^{3N}$ repräsentiert dann den Koeffizientenvektor der Unbekannten \mathbf{v}_h^n in der verwendeten Basis des Finite-Element-Raums. Die ersten drei Terme auf der linken Seite von (4.72) entsprechen drei schwach-besetzten Matrizen: Der erste Term $\langle \omega_{M,k}(\mathbf{m}_h^n) \mathbf{v}_h^n, \boldsymbol{\varphi}_h \rangle_\Omega$ entspricht $\mathbf{M}\mathbf{x}$ mit einer (gewichteten) Masse-Matrix $\mathbf{M} \in \mathbb{R}^{3N \times 3N}$; Der zweite Term $\langle \mathbf{m}_h^n \times \mathbf{v}_h^n, \boldsymbol{\varphi}_h \rangle_\Omega$ entspricht $\mathbf{S}\mathbf{x}$ mit einer schiefsymmetrischen Matrix $\mathbf{S} \in \mathbb{R}^{3N \times 3N}$; Der dritte Term $\langle \nabla \mathbf{v}_h^n, \nabla \boldsymbol{\varphi}_h \rangle_\Omega$ entspricht $\mathbf{A}\mathbf{x}$ mit einer Steifigkeitsmatrix $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{3N \times 3N}$. Im Unterschied zu Algorithmus 4.6 kommt hier jedoch zusätzlich der von der Unbekannten \mathbf{v}_h^n abhängige Term $\langle \boldsymbol{\pi}_h(\mathbf{v}_h^n), \boldsymbol{\varphi}_h \rangle_\Omega$ vor. Falls in der Simulation das Streufeld \mathbf{h}_s berücksichtigt wird, kann dieser Term nicht als $\mathbf{P}\mathbf{x}$ mit einer (schwach-besetzten) Matrix $\mathbf{P} \in \mathbb{R}^{3N \times 3N}$ geschrieben werden (vgl. Kapitel 2.2.2). Folglich verwendet man in der Praxis für (4.72) eine Fixpunktiteration zur Berechnung von $\mathbf{v}_h^n \in \mathcal{K}_h(\mathbf{m}_h^n)$. Inspiriert von [PRS17] modifizieren wir Algorithmus 4.28 so, dass in dem zu lösenden Finite-Element-Gleichungssystem keine Terme der Art $\boldsymbol{\pi}_h(\mathbf{v}_h^n)$ vorkommen. Folglich kann die erhaltene Modifikation von (4.72) in der Praxis direkt gelöst werden.

4.4.2. Explizites Zweischrittverfahren für Terme niedrigerer Ordnung

Wir wollen die in Kapitel 4.4.1 beschriebenen Nachteile von Algorithmus 4.28 gegenüber dem klassischen θ -Schema Algorithmus 4.6 vermeiden. Gleichzeitig soll der verbesserte Konsistenzfehler (siehe Proposition 4.16 bzw. Proposition 4.17) erhalten bleiben. Wir modifizieren für $t \in [k, T]$ in Gleichung (4.71) die linearen Terme niedrigerer Ordnung auf der linken Seite

$$k \langle \boldsymbol{\pi}(\mathbf{v}(t)), \boldsymbol{\varphi} \rangle_\Omega \rightsquigarrow \langle \boldsymbol{\pi}(\mathbf{m}(t)), \boldsymbol{\varphi} \rangle_\Omega - \langle \boldsymbol{\pi}(\mathbf{m}(t-k)), \boldsymbol{\varphi} \rangle_\Omega. \quad (4.74)$$

Die Störung der daraus resultierenden Gleichung verhält sich dabei qualitativ nicht schlechter als die Störung von Gleichung (4.71), auf der Algorithmus 4.28 aus [AKST14] beruht. Diese Erkenntnis fasst der folgende Satz zusammen.

Satz 4.31. *Sei $\mathbf{m} \in C^\infty(\overline{\Omega_T})$ eine Lösung von LLG. Sei $t \in [k, T]$. Dann erfüllt*

$$\mathbf{v}(t) := \mathbf{m}_t(t) + \frac{k}{2} \mathcal{P}_{\mathbf{m}(t)} \mathbf{m}_{tt}(t) \quad (4.75)$$

für alle $\boldsymbol{\varphi} \in \mathcal{K}(\mathbf{m})$

$$\begin{aligned} & \langle \omega_{M,k}(\mathbf{m}(t)) \mathbf{v}(t), \boldsymbol{\varphi} \rangle_\Omega + \langle \mathbf{m}(t) \times \mathbf{v}(t), \boldsymbol{\varphi} \rangle_\Omega + \frac{C_{ex}k}{2} (1 + \rho(k)) \langle \nabla \mathbf{v}(t), \nabla \boldsymbol{\varphi} \rangle_\Omega \\ & = -C_{ex} \langle \nabla \mathbf{m}(t), \nabla \boldsymbol{\varphi} \rangle_\Omega + \frac{3}{2} \langle \boldsymbol{\pi}(\mathbf{m}(t)), \boldsymbol{\varphi} \rangle_\Omega - \frac{1}{2} \langle \boldsymbol{\pi}(\mathbf{m}(t-k)), \boldsymbol{\varphi} \rangle_\Omega + \langle \mathbf{f}, \boldsymbol{\varphi} \rangle_\Omega \\ & \quad + k^2 \langle \mathbf{R}_1(t), \boldsymbol{\varphi} \rangle_\Omega + k^2 \langle \mathbf{R}_2(t), \boldsymbol{\varphi} \rangle_\Omega + k^3 \langle \mathbf{R}_3(t), \boldsymbol{\varphi} \rangle_\Omega + k^2 \langle \boldsymbol{\pi}(\mathbf{R}_6), \boldsymbol{\varphi} \rangle_\Omega \\ & \quad + k\rho(k) \langle \nabla \mathbf{R}_4(t), \nabla \boldsymbol{\varphi} \rangle_\Omega + k^2 \rho(k) \langle \nabla \mathbf{R}_5(t), \nabla \boldsymbol{\varphi} \rangle_\Omega + k^2 \langle \partial_n \mathbf{R}_5(t), \boldsymbol{\varphi} \rangle_{\partial\Omega}, \end{aligned} \quad (4.76)$$

wobei \mathbf{R}_6 ein beschränkte Funktion auf Ω_T bezeichnet, welche die Abschätzung

$$\|\mathbf{R}_6\|_{L^\infty(\Omega_T)} \leq \frac{1}{2} \|\mathbf{m}_{tt}\|_{L^\infty(\Omega_T)} \quad (4.77)$$

erfüllt.

Beweis. Um die Präsentation kompakt zu halten, verzichten wir im Beweis auf Mitführen der Zeitvariable t als Funktionsargument, d.h. wir schreiben zum Beispiel \mathbf{m} anstelle von $\mathbf{m}(t)$. Zusätzlich schreiben wir \mathbf{m}^{old} anstelle von $\mathbf{m}(t-k)$. Nach Satz 4.26 erfüllt \mathbf{v} Gleichung (4.65). Durch partielles Integrieren erhalten wir

$$\begin{aligned} & \langle \omega_{M,k}(\mathbf{m})\mathbf{v}, \boldsymbol{\varphi} \rangle_{\Omega} + \langle \mathbf{m} \times \mathbf{v}, \boldsymbol{\varphi} \rangle_{\Omega} + \frac{C_{\text{ex}}k}{2}(1 + \rho(k))\langle \nabla \mathbf{v}, \nabla \boldsymbol{\varphi} \rangle_{\Omega} - \frac{k}{2}\langle \boldsymbol{\pi}(\mathbf{v}), \boldsymbol{\varphi} \rangle_{\Omega} \\ &= -C_{\text{ex}}\langle \nabla \mathbf{m}, \nabla \boldsymbol{\varphi} \rangle_{\Omega} + \langle \boldsymbol{\pi}(\mathbf{m}), \boldsymbol{\varphi} \rangle_{\Omega} + \langle \mathbf{f}, \boldsymbol{\varphi} \rangle_{\Omega} \\ & \quad + k^2\langle \mathbf{R}_1, \boldsymbol{\varphi} \rangle_{\Omega} + k^2\langle \mathbf{R}_2, \boldsymbol{\varphi} \rangle_{\Omega} + k^3\langle \mathbf{R}_3, \boldsymbol{\varphi} \rangle_{\Omega} \\ & \quad + k\rho(k)\langle \nabla \mathbf{R}_4, \nabla \boldsymbol{\varphi} \rangle_{\Omega} + k^2\rho(k)\langle \nabla \mathbf{R}_5, \nabla \boldsymbol{\varphi} \rangle_{\Omega} + k^2\langle \partial_n \mathbf{R}_5, \boldsymbol{\varphi} \rangle_{\partial\Omega}, \end{aligned} \quad (4.78)$$

vgl. (4.71). Zunächst gilt mit Taylor

$$\mathbf{m}^{\text{old}} + k\mathbf{m}_t = \mathbf{m} + \int_{t-k}^t (\tau - t + k)\mathbf{m}_{tt}(\tau) \, d\tau. \quad (4.79)$$

In Kombination mit (4.75) erhalten wir

$$\frac{\mathbf{m} - \mathbf{m}^{\text{old}}}{k} + \frac{1}{k} \int_{t-k}^t (\tau - t + k)\mathbf{m}_{tt}(\tau) \, d\tau \stackrel{(4.79)}{=} \mathbf{m}_t \stackrel{(4.75)}{=} \mathbf{v} - \frac{k}{2}\mathcal{P}_{\mathbf{m}}\mathbf{m}_{tt}. \quad (4.80)$$

Damit folgt

$$\mathbf{v} = \frac{\mathbf{m} - \mathbf{m}^{\text{old}}}{k} + \frac{1}{k} \int_{t-k}^t (\tau - t + k)\mathbf{m}_{tt}(\tau) \, d\tau + \frac{k}{2}\mathcal{P}_{\mathbf{m}}\mathbf{m}_{tt}. \quad (4.81)$$

Aus der Linearität von $\boldsymbol{\pi}$ und (4.81) folgt

$$k\boldsymbol{\pi}(\mathbf{v}) = \boldsymbol{\pi}(\mathbf{m}) - \boldsymbol{\pi}(\mathbf{m}^{\text{old}}) + \boldsymbol{\pi}\left(\int_{t-k}^t (\tau - t + k)\mathbf{m}_{tt}(\tau) \, d\tau\right) + \frac{k^2}{2}\boldsymbol{\pi}(\mathcal{P}_{\mathbf{m}}\mathbf{m}_{tt}). \quad (4.82)$$

Wir schätzen ab

$$\left| \int_{t-k}^t (\tau - t + k)\mathbf{m}_{tt}(\tau) \, d\tau \right| \leq \|\mathbf{m}_{tt}\|_{L^{\infty}(\Omega_T)} \left| \int_{t-k}^t (\tau - t + k) \, d\tau \right| = \frac{k^2}{2}\|\mathbf{m}_{tt}\|_{L^{\infty}(\Omega_T)}.$$

Da auch $|\mathcal{P}_{\mathbf{m}}\mathbf{m}_{tt}| \leq |\mathbf{m}_{tt}|$ gilt, folgt insgesamt die Behauptung durch Einsetzen von (4.82) in (4.78). \square

4.4.3. Algorithmus

Um unseren effizienten Tangent-Plane-Integrator zu erhalten, gehen wir nun gleich vor wie in Kapitel 4.3.6, den Ausgangspunkt bildet aber Satz 4.31: Wir diskretisieren $\mathcal{K}(\mathbf{m})$ in Gleichung (4.76) im Ort durch $\mathcal{K}_h(\mathbf{m}_h)$. Die Störungen in der rechten Seite approximieren wir im Diskreten durch $\mathbf{0} \in \mathcal{K}_h(\mathbf{m}_h)$, d.h. wir wählen $\mathbf{R}_{1h} := \mathbf{R}_{2h} := \mathbf{R}_{3h} := \mathbf{R}_{4h} := \mathbf{R}_{5h} := \mathbf{R}_{6h} := \mathbf{0}$.

Algorithmus 4.32. Input: M wie in (4.47), ρ wie in (4.63), $N \in \mathbb{N}$, Zeitschrittweite $k = T/N > 0$, Approximationen $\mathbf{m}_h^0, \mathbf{m}_h^1 \in \mathcal{M}_h$ der Anfangsdaten \mathbf{m}^0 und $\mathbf{m}(k)$.

Loop: Für $n = 1, 2, \dots, N-1$ iteriere die folgenden Schritte (a)–(b):

(a) Finde $\mathbf{v}_h^n \in \mathcal{K}_h(\mathbf{m}_h^n)$, sodass für alle $\varphi_h \in \mathcal{K}_h(\mathbf{m}_h^n)$

$$\begin{aligned} & \langle \omega_{M,k}(\mathbf{m}_h^n) \mathbf{v}_h^n, \varphi_h \rangle_\Omega + \langle \mathbf{m}_h^n \times \mathbf{v}_h^n, \varphi_h \rangle_\Omega + \frac{C_{ex}k}{2}(1 + \rho(k)) \langle \nabla \mathbf{v}_h^n, \nabla \varphi_h \rangle_\Omega \\ & = -C_{ex} \langle \nabla \mathbf{m}_h^n, \nabla \varphi_h \rangle_\Omega + \frac{3}{2} \langle \boldsymbol{\pi}_h(\mathbf{m}_h^n), \varphi_h \rangle_\Omega - \frac{1}{2} \langle \boldsymbol{\pi}_h(\mathbf{m}_h^{n-1}), \varphi_h \rangle_\Omega + \langle \mathbf{f}_h, \varphi_h \rangle_\Omega. \end{aligned} \quad (4.83)$$

(b) Definiere $\mathbf{m}_h^{n+1} \in \mathcal{M}_h$ durch

$$\mathbf{m}_h^{n+1}(\mathbf{z}_h) := \frac{\mathbf{m}_h^n(\mathbf{z}_h) + k\mathbf{v}_h^n(\mathbf{z}_h)}{|\mathbf{m}_h^n(\mathbf{z}_h) + k\mathbf{v}_h^n(\mathbf{z}_h)|} \quad \text{für alle } \mathbf{z}_h \in \mathcal{N}_h. \quad (4.84)$$

Output: Approximationen $\mathbf{m}_h^n \approx \mathbf{m}(nT/N)$ für alle $n = 0, \dots, N$.

Theorem 4.33. Algorithmus 4.32 ist wohldefiniert, d.h., Gleichung (4.83) ist in jedem Schritt eindeutig lösbar und der Nenner in (4.84) ist positiv für alle $n = 1, 2, \dots, N-1$.

Beweis. Für alle $\mathbf{m}_h^n \in \mathcal{M}_h$ kann die linke Seite in (4.83) als $a(\mathbf{m}_h^n; \mathbf{v}_h, \varphi_h)$ mit der Bilinearform

$$a(\mathbf{m}_h; \psi_h, \varphi_h) := \langle \omega_{M,k}(\mathbf{m}_h) \psi_h, \varphi_h \rangle_\Omega + \langle \mathbf{m}_h \times \psi_h, \varphi_h \rangle_\Omega + \frac{C_{ex}k(1 + \rho(k))}{2} \langle \nabla \psi_h, \nabla \varphi_h \rangle_\Omega$$

geschrieben werden. Die Bilinearform ist elliptisch auf $\mathcal{K}_h(\mathbf{m}_h)$, da

$$a(\mathbf{m}_h; \varphi_h, \varphi_h) \geq \omega_0 \|\varphi_h\|_{L^2(\Omega)}^2 + \frac{C_{ex}k}{2} \|\nabla \varphi_h\|_{L^2(\Omega)}^2 \quad \text{für alle } \varphi_h \in \mathcal{K}_h(\mathbf{m}_h).$$

Die eindeutige Lösbarkeit folgt nun aus dem Lemma von Lax–Milgram (Lemma A.1). Der Nenner in (4.84) ist stets positiv, insbesondere sogar ≥ 1 , da $\mathbf{v}_h^n \in \mathcal{K}_h(\mathbf{m}_h^n)$ gilt, siehe Lemma 3.4. Diese Beobachtung schließt den Beweis. \square

Algorithmus 4.32 benötigt zwei Anfangsdaten $\mathbf{m}_h^0, \mathbf{m}_h^1 \in \mathcal{M}_h$ mit $\mathbf{m}_h^0 \approx \mathbf{m}^0 = \mathbf{m}(0)$ und $\mathbf{m}_h^1 \approx \mathbf{m}(k)$. Diese Einschränkung ist unpraktikabel. Deshalb wird man in der Praxis von $\mathbf{m}_h^0 \in \mathcal{M}_h$ ausgehend eine Approximation $\mathbf{m}_h^1 \in \mathcal{M}_h$ an $\mathbf{m}(k)$ berechnen. Gleichzeitig soll der verbesserte Konsistenzfehler, siehe Proposition 4.16 bzw. Proposition 4.17, in jedem Zeitschritt erhalten bleiben. Eine Möglichkeit, das zu realisieren, stellt der folgende Algorithmus dar.

Algorithmus 4.34. Input: M wie in (4.47), ρ wie in (4.63), $N \in \mathbb{N}$, Zeitschrittweite $k = T/N > 0$, Approximation $\mathbf{m}_h^0 \in \mathcal{M}_h$ des Anfangsdatums \mathbf{m}^0 .

Preprocessing: Berechne $\mathbf{m}_h^1 \in \mathcal{M}_h$ wie in Algorithmus 4.28, d.h.:

(a) Finde $\mathbf{v}_h^0 \in \mathcal{K}_h(\mathbf{m}_h^0)$, sodass für alle $\varphi_h \in \mathcal{K}_h(\mathbf{m}_h^0)$

$$\begin{aligned} & \langle \omega_{M,k}(\mathbf{m}_h^0) \mathbf{v}_h^0, \varphi_h \rangle_\Omega + \langle \mathbf{m}_h^0 \times \mathbf{v}_h^0, \varphi_h \rangle_\Omega \\ & \quad + \frac{C_{ex}k}{2}(1 + \rho(k)) \langle \nabla \mathbf{v}_h^0, \nabla \varphi_h \rangle_\Omega - \frac{k}{2} \langle \boldsymbol{\pi}_h(\mathbf{v}_h^0), \varphi_h \rangle_\Omega \\ & = -C_{ex} \langle \nabla \mathbf{m}_h^0, \nabla \varphi_h \rangle_\Omega + \langle \boldsymbol{\pi}_h(\mathbf{m}_h^0), \varphi_h \rangle_\Omega + \langle \mathbf{f}_h, \varphi_h \rangle_\Omega. \end{aligned} \quad (4.85)$$

(b) Definiere $\mathbf{m}_h^1 \in \mathcal{M}_h$ durch

$$\mathbf{m}_h^1(\mathbf{z}_h) := \frac{\mathbf{m}_h^0(\mathbf{z}_h) + k\mathbf{v}_h^0(\mathbf{z}_h)}{|\mathbf{m}_h^0(\mathbf{z}_h) + k\mathbf{v}_h^0(\mathbf{z}_h)|} \quad \text{für alle } \mathbf{z}_h \in \mathcal{N}_h. \quad (4.86)$$

Loop: Für $n = 1, 2, \dots, N-1$ iteriere die folgenden Schritte (a)–(b):

(a) Finde $\mathbf{v}_h^n \in \mathcal{K}_h(\mathbf{m}_h^n)$, sodass für alle $\boldsymbol{\varphi}_h \in \mathcal{K}_h(\mathbf{m}_h^n)$

$$\begin{aligned} & \langle \omega_{M,k}(\mathbf{m}_h^n) \mathbf{v}_h^n, \boldsymbol{\varphi}_h \rangle_\Omega + \langle \mathbf{m}_h^n \times \mathbf{v}_h^n, \boldsymbol{\varphi}_h \rangle_\Omega + \frac{C_{ex}k}{2} (1 + \rho(k)) \langle \nabla \mathbf{v}_h^n, \nabla \boldsymbol{\varphi}_h \rangle_\Omega \\ & = -C_{ex} \langle \nabla \mathbf{m}_h^n, \nabla \boldsymbol{\varphi}_h \rangle_\Omega + \frac{3}{2} \langle \boldsymbol{\pi}_h(\mathbf{m}_h^n), \boldsymbol{\varphi}_h \rangle_\Omega - \frac{1}{2} \langle \boldsymbol{\pi}_h(\mathbf{m}_h^{n-1}), \boldsymbol{\varphi}_h \rangle_\Omega + \langle \mathbf{f}_h, \boldsymbol{\varphi}_h \rangle_\Omega. \end{aligned} \quad (4.87)$$

(b) Definiere $\mathbf{m}_h^{n+1} \in \mathcal{M}_h$ durch

$$\mathbf{m}_h^{n+1}(\mathbf{z}_h) := \frac{\mathbf{m}_h^n(\mathbf{z}_h) + k\mathbf{v}_h^n(\mathbf{z}_h)}{|\mathbf{m}_h^n(\mathbf{z}_h) + k\mathbf{v}_h^n(\mathbf{z}_h)|} \quad \text{für alle } \mathbf{z}_h \in \mathcal{N}_h. \quad (4.88)$$

Output: Approximationen $\mathbf{m}_h^n \approx \mathbf{m}(nT/N)$ für alle $n = 0, \dots, N$.

Bemerkung 4.35. (i) Aus Satz 4.33 folgt, dass Algorithmus 4.34 nach dem ersten Zeitschritt, d.h. nachdem \mathbf{m}_h^1 berechnet wurde, für alle $k > 0$ wohldefiniert ist. Damit der Pre-processing Schritt wohldefiniert ist, sind wie für die Wohldefiniertheit von Algorithmus 4.28 die Voraussetzungen von Satz 4.29 hinreichend.

(ii) Satz 4.31 zeigt, dass man für unseren effizienten Tangent-Plane-Integrator ebenso wie für den Integrator aus [AKST14] (Algorithmus 4.28) formal zweite Ordnung in der Zeit erwarten kann. Abbildung 4.4(a) belegt diese Beobachtung.

(iii) Durch die lokale Gewichtung $\omega_{M,k}(\mathbf{m}_h^n)$ des Masse-Terms in Gleichung (4.87) ist es aus praktischer Sicht im Vergleich zu Algorithmus 4.6 teurer die zugehörige Masse-Matrix zu assemblieren. Insbesondere ist die Gewichtung von \mathbf{m}_h^n abhängig. Infolgedessen ist die Masse-Matrix instationär und muss in jedem Zeitschritt neu assembliert werden. Dass sich dieser Nachteil unseres effizienten Tangent-Plane-Integrators (sowie des Integrators aus [AKST14]) im Vergleich zum θ -Schema (Algorithmus 4.6) in der Laufzeit niederschlägt, zeigt Abbildung 4.4(b).

(iv) Der entscheidende Vorteil unseres effizienten Tangent-Plane-Integrators gegenüber Algorithmus 4.28 aus [AKST14] ist, dass Terme der Form $\boldsymbol{\pi}_h(\mathbf{v}_h^n)$ im Gleichungssystem (4.87) vermieden werden. Folglich kann nach dem ersten Zeitschritt das Gleichungssystem (4.87) in jedem Zeitschritt direkt gelöst werden. Abbildung 4.4(b) zeigt, dass dieser Unterschied die Laufzeit deutlich reduziert.

Experiment 4.36. Ziel: Wir wollen die Konvergenzrate (in der Zeitschrittweite k) unseres effizienten Tangent-Plane-Integrators (Algorithmus 4.34) untersuchen. Insbesondere wollen wir belegen, dass die explizite Integration von Termen niedrigerer Ordnung mittels Adams–Bashforth-artigem Zweischrittverfahren die verbesserte Konvergenzordnung von Algorithmus 4.28 nicht reduziert, während die Laufzeit deutlich verringert wird.

Wir betrachten wir das in [PRS17, Section 6.1] vorgeschlagene, und ebenfalls in [DPP⁺17, Section 7.1] untersuchte Modellproblem.

Setting: Auf dem Gebiet $\Omega = (0, 1)^3$ sei die Anfangsbedingung konstant $\mathbf{m}^0 \equiv (1, 0, 0)$.

Parameter: Wir simulieren die Ummagnetisierung unter dem konstanten extern angelegten Feld $\mathbf{f} \equiv (-2, -1/2, 0)$. Die Simulation soll Einflüsse des Streufelds berücksichtigen und Anisotropie vernachlässigen, d.h. $C_{\text{ani}} = 0$ und $\boldsymbol{\pi}(\mathbf{m}) = \mathbf{h}_s(\mathbf{m})$. Wir wählen die Austausch-Konstante $C_{\text{ex}} = 1$, den Gilbert-Dämpfungskoeffizient $\alpha = 1$ und simulieren die Dynamik bis zum Zeitpunkt $T = 5$.

Diskretisierung: Die Geometrie diskretisieren wir durch eine Triangulierung \mathcal{T}_h mit maximalem Elementdurchmesser $h = 1/8$ erzeugt in Netgen [Sch], bestehend aus 3904 Tetraedern, respektive 898 Knoten. Für die Zeitdiskretisierung verwenden wir verschiedene Zeitschrittweiten $k = 2^\ell \cdot k_{\text{ref}}$ für $\ell \in \{1, 2, 3, 4, 5\}$ und $k_{\text{ref}} = 5 \cdot 10^{-5}$.

Verfahren: Wir vergleichen die Konvergenzraten und die Laufzeiten von Algorithmus 4.6 (TPS1) mit $\theta = 0.5$, sowie Algorithmus 4.28 (TPS2) und Algorithmus 4.34 (TPS2+AB) jeweils mit den Wahlen $M(k) = 1/|k \log k|$ und $\rho(k) = |k \log k|$. Wir lösen die auftretenden linearen Gleichungssysteme wie in Kapitel 6 beschrieben mit einer Genauigkeit von $\tau = 10^{-10}$.

Referenzlösung: Da keine analytische Lösung bekannt ist, berechnen wir die Referenzlösung mit der feineren Zeitschrittweite k_{ref} und TPS2. Für diesen Integrator wurde die Konvergenz zweiter Ordnung in [AKST14, Chapter 7.1] numerisch verifiziert. Wir verwenden zur Berechnung der Referenzlösung $\mathbf{m}_{hk_{\text{ref}}}$ die kanonischen Wahlen $M(k_{\text{ref}}) = 1/|k_{\text{ref}} \log k_{\text{ref}}|$ und $\rho(k_{\text{ref}}) = |k_{\text{ref}} \log k_{\text{ref}}|$.

Diskussion: In Abbildung 4.4(a) vergleichen wir die Fehler

$$\max_{n \in \{1, \dots, N\}} \|\mathbf{m}_{hk_{\text{ref}}}(t_n) - \mathbf{m}_{hk}(t_n)\|_{\mathbf{H}^1(\Omega)}$$

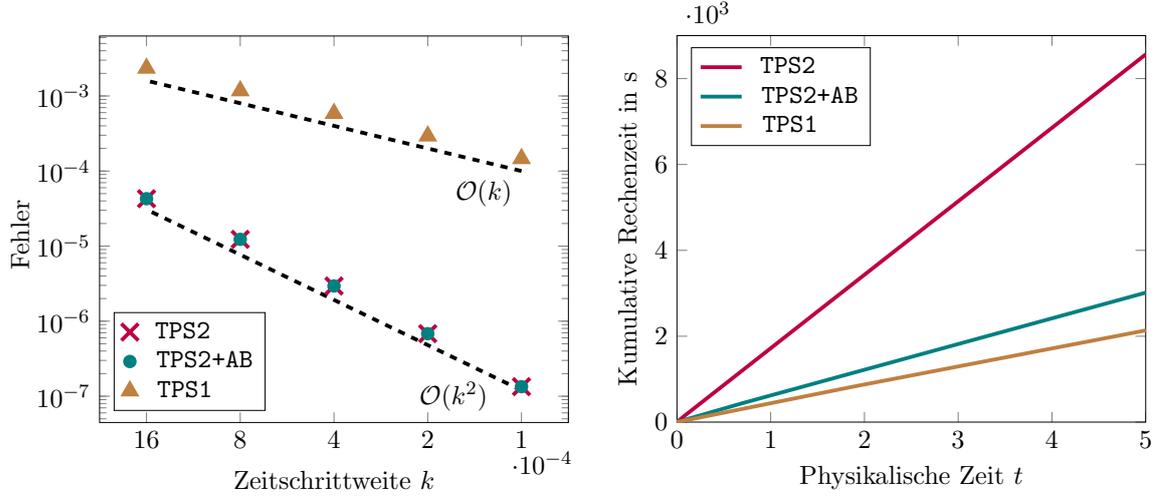
für die verschiedenen Verfahren und verschiedene k . Unserer Analysis entsprechend, beobachten wir für unseren effizienten Tangent-Plane-Integrator TPS2+AB ebenso wie für TPS2 quadratische Konvergenz gegen die Referenzlösung $\mathbf{m}_{hk_{\text{ref}}}$. Wie erwartet, fällt der Fehler für das θ -Schema TPS1 nur linear in k .

Abbildung 4.4(b) zeigt die benötigte Rechenzeit der verschiedenen Verfahren für die Simulation mit der Zeitschrittweite $k = 4 \cdot 10^{-4}$. Da wir in TPS2+AB Streufeld-Terme nach dem ersten Zeitschritt mittels Zweischrittverfahren explizit in der Zeit integrieren, vermeiden wir die für TPS2 benötigte Fixpunktiteration (vgl. Bemerkung 4.35(iv)). Abbildung 4.4(b) zeigt, dass dadurch die Laufzeit im Vergleich zu TPS2 signifikant reduziert wird. Dort ist ebenfalls zu sehen, dass die Laufzeit von TPS2+AB höher ist als jene von TPS1. Der Grund dafür ist, dass die Masse-Matrix in TPS2+AB ebenso wie in TPS2 nicht stationär ist, und deshalb in jedem Zeitschritt neu assembliert werden muss.

Unter Berücksichtigung von beidem, der Laufzeit und der Exaktheit des Integrators, ist unser effizienter Tangent-Plane-Integrator die beste Wahl.

Bemerkung 4.37. (i) Um die Präsentation der Beweise in Kapitel 5 so lesbar wie möglich zu gestalten, führen wir die Notation $\boldsymbol{\pi}_h(\mathbf{m}_h^{-1})$ ein. Damit soll (4.87) auch für $n = 0$ Sinn machen:

Im Preprocessing Schritt $n = 0$ von Algorithmus 4.34 lösen wir Gleichung (4.85) um eine Approximation $\mathbf{m}_h^1 \approx \mathbf{m}(k)$ zu erhalten. Durch direktes Einsetzen stellt man fest, dass (4.85) äquivalent zu (4.87) für $n = 0$ ist, wenn man $\boldsymbol{\pi}_h(\mathbf{m}_h^{-1}) := \boldsymbol{\pi}_h(\mathbf{m}_h^0) - k\boldsymbol{\pi}_h(\mathbf{v}_h^0)$ in



(a) Experimentelle Konvergenzrate: Der Fehler $\max_{n \in \{1, \dots, N\}} \|\mathbf{m}_{hk_{\text{ref}}}(t_n) - \mathbf{m}_{hk}(t_n)\|_{\mathbf{H}^1(\Omega)}$ zur Referenzlösung im doppelt-logarithmischen Plot. (b) Effizienz: Kumulative Rechenzeit für $k = 4 \cdot 10^{-4}$.

Abbildung 4.4.: Ergebnisse von Experiment 4.36: Algorithmus 4.6 (TPS1), Algorithmus 4.28 (TPS2) und Algorithmus 4.34 (TPS2+AB) im Vergleich.

(4.87) wählt. Da wir im ersten Zeitschritt $n = 0$ Gleichung (4.85) lösen, wird die Notation

$$\boldsymbol{\pi}_h(\mathbf{m}_h^{-1}) := \boldsymbol{\pi}_h(\mathbf{m}_h^0) - k\boldsymbol{\pi}_h(\mathbf{v}_h^0) \quad (4.89)$$

motiviert. Mit dieser notationellen Konvention — wir merken an, dass \mathbf{m}_h^{-1} im Allgemeinen nicht existiert — erfüllt der Output von Algorithmus 4.34 Gleichung (4.87) auch für $n = 0$.

(ii) Dementsprechend werden wir auch im Kontinuierlichen die Notation

$$\boldsymbol{\pi}(\mathbf{m}_h^{-1}) := \boldsymbol{\pi}(\mathbf{m}_h^0) - k\boldsymbol{\pi}(\mathbf{v}_h^0) \quad (4.90)$$

verwenden.

(iii) An einer Stelle im Beweis der Energieabschätzung Theorem 5.1(c) benötigen wir eine Abschätzung für $|\langle \boldsymbol{\pi}(\mathbf{m}_h^n - \mathbf{m}_h^{n-1}), \mathbf{v}_h^n \rangle_\Omega|$. Mit Lemma 3.14 und Ausnutzen der Stetigkeit von $\boldsymbol{\pi}$ werden wir so eine Abschätzung für $n = 1, 2, \dots, N$ erhalten, jedoch nicht für $n = 0$. In diesem Fall gilt aber mit der Stetigkeit von $\boldsymbol{\pi}$ und der eben eingeführten Definition (4.90) von $\boldsymbol{\pi}(\mathbf{m}_h^{-1})$, die Abschätzung

$$k|\langle \boldsymbol{\pi}(\mathbf{m}_h^0 - \mathbf{m}_h^{-1}), \mathbf{v}_h^0 \rangle_\Omega| \stackrel{(4.90)}{=} k^2|\langle \boldsymbol{\pi}(\mathbf{v}_h^0), \mathbf{v}_h^0 \rangle_\Omega| \leq C_\pi k^2 \|\mathbf{v}_h^0\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)}^2. \quad (4.91)$$

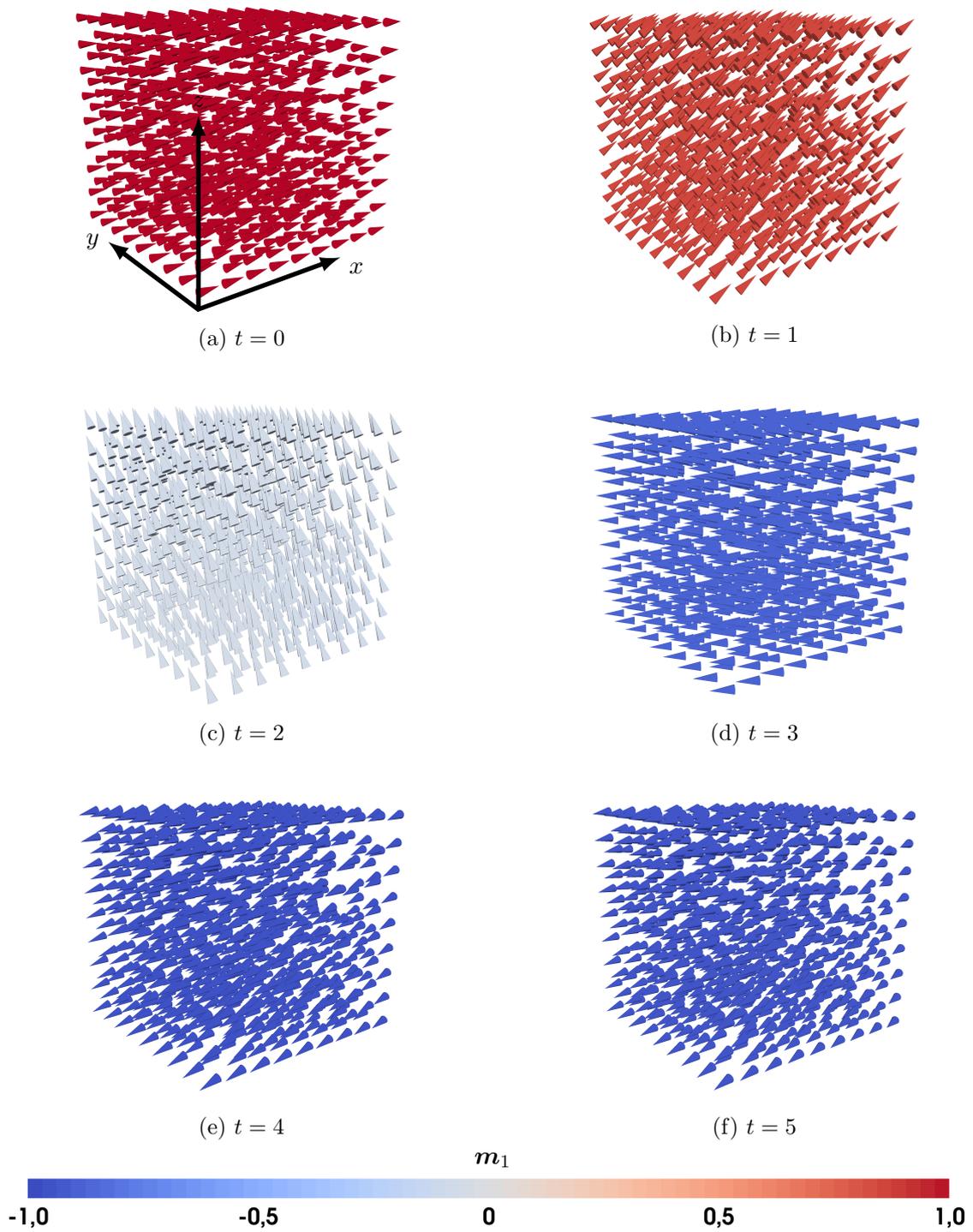


Abbildung 4.5.: Magnetisierung zu verschiedenen Zeitpunkten von Experiment 4.36.

5. Konvergenz

In Kapitel 4 haben wir Tangent-Plane-Integratoren und zugehörige Konvergenzresultate aus [AJ06], [BKP08], [Alo08], [AKT12], [Gol12] und [AKST14] zitiert. Unser Konvergenzresultat für den interpolierten Output von Algorithmus 4.34 lautet nun wie folgt.

5.1. Konvergenzresultat

In diesem Kapitel werden wir an einigen Stellen von Folgen zu Teilfolgen übergehen. Wir merken es explizit an, wenn wir von einer Folge $(f_n)_{n \in \mathbb{N}}$ die Teilfolge $(f_{n_k})_{k \in \mathbb{N}}$ extrahieren, jedoch werden wir diese Teilfolge im Allgemeinen wieder mit $(f_n)_{n \in \mathbb{N}}$ anstelle von $(f_{n_k})_{k \in \mathbb{N}}$ bezeichnen.

Theorem 5.1. (a) Sei $(\mathbf{m}_h^0)_{h>0} \subset \mathcal{M}_h$ mit

$$\|\mathbf{m}_h^0\|_{\mathbf{H}^1(\Omega)} \leq \tilde{C}_0 \quad \text{uniform für } h > 0, \quad (5.1)$$

mit einer von $h > 0$ unabhängigen Konstante $\tilde{C}_0 > 0$. Sei der Approximationsoperator $\pi_h: \mathbf{V}_h \rightarrow \mathbf{L}^2(\Omega)$ stabil im folgenden Sinn: Für alle $\varphi_h \in \mathbf{V}_h$ gelte

$$\|\pi_h(\varphi_h)\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)} \leq \tilde{C}_\pi \|\varphi_h\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)}, \quad (5.2)$$

mit einer von $h > 0$ unabhängigen Konstante $\tilde{C}_\pi > 0$. Weiter existiere eine von $h > 0$ unabhängige Konstante $\tilde{C}_f > 0$, sodass

$$\|\mathbf{f}_h\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)} \leq \tilde{C}_f \quad \text{für alle } h > 0. \quad (5.3)$$

Dann existieren $\mathbf{m} \in L^\infty(0, T; \mathbf{H}^1(\Omega)) \cap \mathbf{H}^1(\Omega_T)$, $\mathbf{v} \in \mathbf{L}^2(\Omega_T)$, und Teilfolgen des interpolierten Outputs \mathbf{m}_{hk} , \mathbf{m}_{hk}^- , \mathbf{m}_{hk}^+ , \mathbf{v}_{hk}^- von Algorithmus 4.34, definiert durch (3.1a)–(3.1b), welche

$$\mathbf{m}_{hk} \rightharpoonup \mathbf{m} \quad \text{in } \mathbf{H}^1(\Omega_T), \quad (5.4a)$$

$$\mathbf{m}_{hk} \rightarrow \mathbf{m} \quad \text{in } \mathbf{L}^2(\Omega_T), \quad (5.4b)$$

$$\mathbf{v}_{hk}^- \rightharpoonup \mathbf{v} \quad \text{in } \mathbf{L}^2(\Omega_T), \quad (5.4c)$$

$$\mathbf{m}_{hk}^-, \mathbf{m}_{hk}^+ \rightarrow \mathbf{m} \quad \text{in } \mathbf{L}^2(\Omega_T), \quad (5.4d)$$

$$\nabla \mathbf{m}_{hk}^-, \nabla \mathbf{m}_{hk}^+ \rightharpoonup \nabla \mathbf{m} \quad \text{in } \mathbf{L}^2(\Omega_T), \quad (5.4e)$$

$$\mathbf{m}_{hk}, \mathbf{m}_{hk}^-, \mathbf{m}_{hk}^+ \overset{*}{\rightharpoonup} \mathbf{m} \quad \text{in } L^\infty(0, T; \mathbf{H}^1(\Omega)), \quad (5.4f)$$

$$\partial_t \mathbf{m} = \mathbf{v} \quad \text{fast überall in } \mathbf{L}^2(\Omega_T), \quad (5.4g)$$

$$|\mathbf{m}| = 1 \quad \text{fast überall in } \mathbf{L}^2(\Omega_T), \quad (5.4h)$$

erfüllen, wobei alle Konvergenzen in (5.4) für dieselbe Teilfolge gelten.

(b) Zusätzlich seien die Funktionen $\rho(\cdot)$ und $M(\cdot)$ so gewählt, dass $\rho(k) \rightarrow 0$ und $kM(k) \rightarrow 0$ für $h, k \rightarrow 0$. Weiter gelte $k = \mathbf{o}(\rho(k))$ oder die CFL-Bedingung $k = \mathbf{o}(h)$. Sei $\mathbf{m}^0 \in \mathbf{H}^1(\Omega)$ mit $|\mathbf{m}^0| = 1$ fast überall in Ω und angenommen, es existieren Teilfolgen, sodass

$$\mathbf{m}_h^0 \rightharpoonup \mathbf{m}^0 \quad \text{in } \mathbf{H}^1(\Omega) \text{ für } h \rightarrow 0, \quad (5.5a)$$

$$\mathbf{f}_h \rightharpoonup \mathbf{f} \quad \text{in } \mathbf{L}^2(\Omega) \text{ für } h \rightarrow 0, \quad (5.5b)$$

$$\pi_h(\mathbf{m}_{hk}^-), \pi_h(\mathbf{m}_{hk}^+) \rightharpoonup \pi(\mathbf{m}) \quad \text{in } \mathbf{L}^2(\Omega_T) \text{ für } h, k \rightarrow 0. \quad (5.5c)$$

Dann ist die Grenzfunktion $\mathbf{m} \in L^\infty(0, T; \mathbf{H}^1(\Omega)) \cap \mathbf{H}^1(\Omega_T)$ aus (a) eine schwache Lösung von LLG im Sinne von Definition 2.2(i)–(iii).

(c) Zusätzlich gelte $\mathbf{f} \in \mathbf{L}^3(\Omega)$ und (5.5a)–(5.5c) mit starker Konvergenz. Weiter sei $\pi: \mathbf{L}^2(\Omega) \rightarrow \mathbf{L}^2(\Omega)$ ein stetiger, linearer, selbstadjungierter Operator mit

$$\|\pi(\varphi_h)\|_{\mathbf{L}^3(\Omega)} \leq C_\pi \|\varphi_h\|_{\mathbf{L}^\infty(\Omega)} \quad \text{für alle } \varphi_h \in \mathbf{V}_h \quad (5.6)$$

mit einer von $h > 0$ unabhängigen Konstante $C_\pi > 0$. Dann ist die Grenzfunktion $\mathbf{m} \in L^\infty(0, T; \mathbf{H}^1(\Omega)) \cap \mathbf{H}^1(\Omega_T)$ aus (a) eine schwache Lösung von LLG im Sinne von Definition 2.2(i)–(iv).

5.2. Konvergenzbeweis

Unser Beweis von Theorem 5.1 folgt in vielen Teilen den Ideen aus [AKST14]. Da unser Algorithmus 4.34 sich jedoch durch die in Kapitel 4.4 eingeführten Modifikationen von Algorithmus 4.28 unterscheidet, kann der Beweis aus [AKST14] nicht direkt übernommen werden. Wir unterteilen die Präsentation des Konvergenzbeweises in die folgenden Schritte:

- In Kapitel 5.2.1 beweisen wir eine diskrete Energieabschätzung für $(\mathbf{m}_h^n)_{n=0}^N, (\mathbf{v}_h^n)_{n=0}^N$.
- In Kapitel 5.2.2 extrahieren wir Teilfolgen des interpolierten Outputs $\mathbf{m}_{hk}, \mathbf{m}_{hk}^-, \mathbf{v}_{hk}^-$ von Algorithmus 4.34, welche (schwach) gegen die Grenzfunktionen $\mathbf{m} \in \mathbf{H}^1(\Omega_T)$ und $\mathbf{v} \in \mathbf{L}^2(\Omega_T)$ konvergieren für $h, k \rightarrow 0$.
- In Kapitel 5.2.3 zeigen wir, dass die Grenzfunktion \mathbf{m} unter den zusätzlichen Annahmen von Theorem 5.1(b) eine schwache Lösung von LLG im Sinne von Definition 2.2(i)–(iii) ist.
- In Kapitel 5.2.4 zeigen wir, dass unter den zusätzlichen stärkeren Voraussetzungen von Theorem 5.1(c) die Grenzfunktion \mathbf{m} sogar eine physikalische schwache Lösung von LLG im Sinne von Definition 2.2(i)–(iv) ist.

Wir erinnern daran, dass der Output von Algorithmus 4.34 durch Einführung der Notation $\pi_h(\mathbf{m}_h^{-1})$ die Gleichung (4.87) auch für $n = 0$ erfüllt, siehe Bemerkung 4.37. Des Weiteren werden wir in diesem Kapitel die Identität mit \mathcal{I} bezeichnen.

5.2.1. Vorbereitung — Diverse Ungleichungen & diskrete Energieabschätzung

Zunächst zeigen wir, dass die diskrete Energie beschränkt bleibt.

Lemma 5.2. *Sei $k_0 \leq \alpha/(3\tilde{C}_\pi)$ so, dass $k_0 M(k_0) \leq \alpha$. Dann gilt für alle $k \leq k_0$, dass der Output $(\mathbf{m}_h^n)_{n=0}^N, (\mathbf{v}_h^n)_{n=0}^N$ von Algorithmus 4.34 für alle $1 \leq j \leq N$ die Abschätzung*

$$\|\mathbf{m}_h^j\|_{\mathbf{H}^1(\Omega)}^2 + k \sum_{n=0}^{j-1} \|\mathbf{v}_h^n\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)}^2 + k^2 \rho(k) \sum_{n=0}^{j-1} \|\nabla \mathbf{v}_h^n\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)}^2 \leq C \quad (5.7)$$

erfüllt. Die Konstante $C > 0$ hängt nur von $T, |\Omega|, \tilde{C}_f, \tilde{C}_\pi, \alpha, \omega_0, k_0, C_{ex}$ und \tilde{C}_0 ab.

Beweis. Testen wir (4.87) mit der Lösung $\varphi_h = \mathbf{v}_h^n$, so erhalten wir

$$\begin{aligned} & \langle \omega_{M,k}(\mathbf{m}_h^n) \mathbf{v}_h^n, \mathbf{v}_h^n \rangle_\Omega + \langle \mathbf{m}_h^n \times \mathbf{v}_h^n, \mathbf{v}_h^n \rangle_\Omega + \frac{C_{ex}k}{2}(1 + \rho(k)) \|\nabla \mathbf{v}_h^n\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)}^2 \\ &= -C_{ex} \langle \nabla \mathbf{m}_h^n, \nabla \mathbf{v}_h^n \rangle_\Omega + \frac{3}{2} \langle \pi_h(\mathbf{m}_h^n), \mathbf{v}_h^n \rangle_\Omega - \frac{1}{2} \langle \pi_h(\mathbf{m}_h^{n-1}), \mathbf{v}_h^n \rangle_\Omega + \langle \mathbf{f}_h, \mathbf{v}_h^n \rangle_\Omega. \end{aligned} \quad (5.8)$$

Aufgrund der Orthogonalität $\langle \mathbf{m}_h^n \times \mathbf{v}_h^n, \mathbf{v}_h^n \rangle_\Omega = 0$ (siehe Lemma A.11) lautet die Gleichung nach Umordnen der Terme und Multiplikation mit dem Faktor $2k$

$$\begin{aligned} & C_{ex}k^2 \|\nabla \mathbf{v}_h^n\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)}^2 + 2C_{ex}k \langle \nabla \mathbf{m}_h^n, \nabla \mathbf{v}_h^n \rangle_\Omega \\ &= -2k \langle \omega_{M,k}(\mathbf{m}_h^n) \mathbf{v}_h^n, \mathbf{v}_h^n \rangle_\Omega - C_{ex}k^2 \rho(k) \|\nabla \mathbf{v}_h^n\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)}^2 \\ & \quad + 3k \langle \pi_h(\mathbf{m}_h^n), \mathbf{v}_h^n \rangle_\Omega - k \langle \pi_h(\mathbf{m}_h^{n-1}), \mathbf{v}_h^n \rangle_\Omega + 2k \langle \mathbf{f}_h, \mathbf{v}_h^n \rangle_\Omega \end{aligned} \quad (5.9)$$

für alle $n = 0, \dots, N-1$. Lemma 3.10 zeigt

$$\begin{aligned} \|\nabla \mathbf{m}_h^{n+1}\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)}^2 &= \left\| \nabla \mathcal{I}_h \left(\frac{\mathbf{m}_h^n + k \mathbf{v}_h^n}{|\mathbf{m}_h^n + k \mathbf{v}_h^n|} \right) \right\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)}^2 \\ &\stackrel{(3.13)}{\leq} \|\nabla \mathbf{m}_h^n + k \nabla \mathbf{v}_h^n\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)}^2 \\ &= \|\nabla \mathbf{m}_h^n\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)}^2 + 2k \langle \nabla \mathbf{m}_h^n, \nabla \mathbf{v}_h^n \rangle_\Omega + k^2 \|\nabla \mathbf{v}_h^n\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)}^2. \end{aligned} \quad (5.10)$$

Kombinieren von (5.9) und (5.10) führt auf

$$\begin{aligned} C_{ex} \|\nabla \mathbf{m}_h^{n+1}\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)}^2 &\stackrel{(5.10)}{\leq} C_{ex} \|\nabla \mathbf{m}_h^n\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)}^2 + 2C_{ex}k \langle \nabla \mathbf{m}_h^n, \nabla \mathbf{v}_h^n \rangle_\Omega + C_{ex}k^2 \|\nabla \mathbf{v}_h^n\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)}^2 \\ &\stackrel{(5.9)}{\leq} C_{ex} \|\nabla \mathbf{m}_h^n\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)}^2 - 2k \langle \omega_{M,k}(\mathbf{m}_h^n) \mathbf{v}_h^n, \mathbf{v}_h^n \rangle_\Omega - C_{ex}k^2 \rho(k) \|\nabla \mathbf{v}_h^n\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)}^2 \\ & \quad + 3k \langle \pi_h(\mathbf{m}_h^n), \mathbf{v}_h^n \rangle_\Omega - k \langle \pi_h(\mathbf{m}_h^{n-1}), \mathbf{v}_h^n \rangle_\Omega + 2k \langle \mathbf{f}_h, \mathbf{v}_h^n \rangle_\Omega. \end{aligned} \quad (5.11)$$

Nun müssen wir zwischen den Fällen $n = 0$ und $n > 0$ unterscheiden: Für $n > 0$ erhalten wir mit der Cauchy-Schwarz'schen Ungleichung (Lemma 3.10), Stabilität (5.2) von π_h sowie

gleichmäßiger Beschränktheit (5.3) von \mathbf{f}_h , dass

$$\begin{aligned}
 & 3k\langle \boldsymbol{\pi}_h(\mathbf{m}_h^n), \mathbf{v}_h^n \rangle_\Omega - k\langle \boldsymbol{\pi}_h(\mathbf{m}_h^{n-1}), \mathbf{v}_h^n \rangle_\Omega + 2k\langle \mathbf{f}_h, \mathbf{v}_h^n \rangle_\Omega \\
 & \leq \left(3k\|\boldsymbol{\pi}_h(\mathbf{m}_h^n)\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)} + k\|\boldsymbol{\pi}_h(\mathbf{m}_h^{n-1})\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)} + 2k\|\mathbf{f}_h\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)} \right) \|\mathbf{v}_h^n\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)} \\
 & \stackrel{(5.2), (5.3)}{\leq} \left(3\tilde{C}_\pi k\|\mathbf{m}_h^n\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)} + \tilde{C}_\pi k\|\mathbf{m}_h^{n-1}\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)} + 2k\tilde{C}_f \right) \|\mathbf{v}_h^n\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)} \\
 & \leq (4\tilde{C}_\pi|\Omega|^{1/2} + 2\tilde{C}_f)k\|\mathbf{v}_h^n\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)} \leq C_1k\|\mathbf{v}_h^n\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)},
 \end{aligned} \tag{5.12}$$

wobei die vorletzte Abschätzung aus Lemma 3.11 folgt. Die Konstante $C_1 > 0$ hängt hier nur von \tilde{C}_f , $|\Omega|$ und \tilde{C}_π ab. Einsetzen von (5.12) in (5.11) zeigt für $n > 0$ also

$$\begin{aligned}
 C_{\text{ex}}\|\nabla \mathbf{m}_h^{n+1}\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)}^2 & \leq C_{\text{ex}}\|\nabla \mathbf{m}_h^n\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)}^2 - 2k\langle \omega_{M,k}(\mathbf{m}_h^n)\mathbf{v}_h^n, \mathbf{v}_h^n \rangle_\Omega \\
 & \quad - C_{\text{ex}}k^2\rho(k)\|\nabla \mathbf{v}_h^n\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)}^2 + C_1k\|\mathbf{v}_h^n\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)}.
 \end{aligned} \tag{5.13}$$

Die Young'sche Ungleichung (Lemma A.13) in der Form

$$C_1k\|\mathbf{v}_h^n\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)} \leq k\omega_0\|\mathbf{v}_h^n\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)}^2 + \frac{kC_1^2}{4\omega_0}$$

gemeinsam mit $0 < \omega_0 = \alpha/(1 + k_0M(k_0)/(2\alpha)) \stackrel{(4.49)}{\leq} \omega_{M,k}(\cdot)$ liefert

$$\begin{aligned}
 -2k\langle \omega_{M,k}(\mathbf{m}_h^n)\mathbf{v}_h^n, \mathbf{v}_h^n \rangle_\Omega + C_1k\|\mathbf{v}_h^n\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)} & \leq -2k\omega_0\|\mathbf{v}_h^n\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)}^2 + k\omega_0\|\mathbf{v}_h^n\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)}^2 + \frac{kC_1^2}{4\omega_0} \\
 & \leq -k\omega_0\|\mathbf{v}_h^n\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)}^2 + kC_2,
 \end{aligned} \tag{5.14}$$

mit einer Konstante $C_2 > 0$, welche nur von C_1 und ω_0^{-1} abhängt. Einsetzen von (5.14) in (5.13) zeigt für $n > 0$ schließlich

$$\begin{aligned}
 C_{\text{ex}}\|\nabla \mathbf{m}_h^{n+1}\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)}^2 + k\omega_0\|\mathbf{v}_h^n\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)}^2 + C_{\text{ex}}k^2\rho(k)\|\nabla \mathbf{v}_h^n\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)}^2 \\
 \leq C_{\text{ex}}\|\nabla \mathbf{m}_h^n\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)}^2 + kC_2.
 \end{aligned} \tag{5.15}$$

Für $n = 0$ lautet Ungleichung (5.11) aufgrund der Definition (4.89) von $\boldsymbol{\pi}_h(\mathbf{m}_h^{-1})$

$$\begin{aligned}
 C_{\text{ex}}\|\nabla \mathbf{m}_h^1\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)}^2 & \leq C_{\text{ex}}\|\nabla \mathbf{m}_h^0\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)}^2 - 2k\langle \omega_{M,k}(\mathbf{m}_h^0)\mathbf{v}_h^0, \mathbf{v}_h^0 \rangle_\Omega - C_{\text{ex}}k^2\rho(k)\|\nabla \mathbf{v}_h^0\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)}^2 \\
 & \quad + 2k\langle \boldsymbol{\pi}_h(\mathbf{m}_h^0), \mathbf{v}_h^0 \rangle_\Omega + k^2\langle \boldsymbol{\pi}_h(\mathbf{v}_h^0), \mathbf{v}_h^0 \rangle_\Omega + 2k\langle \mathbf{f}_h, \mathbf{v}_h^0 \rangle_\Omega.
 \end{aligned} \tag{5.16}$$

Analog zu (5.12) erhalten wir mit $\omega_{M,k}(\cdot) \geq \omega_0$ die Abschätzung

$$\begin{aligned}
 & -2k\langle \omega_{M,k}(\mathbf{m}_h^0)\mathbf{v}_h^0, \mathbf{v}_h^0 \rangle_\Omega + 2k\langle \boldsymbol{\pi}_h(\mathbf{m}_h^0), \mathbf{v}_h^0 \rangle_\Omega + 2k\langle \mathbf{f}_h, \mathbf{v}_h^0 \rangle_\Omega + k^2\langle \boldsymbol{\pi}_h(\mathbf{v}_h^0), \mathbf{v}_h^0 \rangle_\Omega \\
 & \leq -2k\omega_0\|\mathbf{v}_h^0\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)}^2 + 2k\tilde{C}_\pi|\Omega|^{1/2}\|\mathbf{v}_h^0\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)} + 2k\tilde{C}_f\|\mathbf{v}_h^0\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)} + k^2\tilde{C}_\pi\|\mathbf{v}_h^0\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)}^2 \\
 & \leq -2k\omega_0\|\mathbf{v}_h^0\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)}^2 + C_1k\|\mathbf{v}_h^0\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)} + \tilde{C}_\pi k^2\|\mathbf{v}_h^0\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)}^2.
 \end{aligned} \tag{5.17}$$

Einsetzen von (5.17) in (5.16) zeigt

$$\begin{aligned} C_{\text{ex}} \|\nabla \mathbf{m}_h^1\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)}^2 &\leq C_{\text{ex}} \|\nabla \mathbf{m}_h^0\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)}^2 - C_{\text{ex}} k^2 \rho(k) \|\nabla \mathbf{v}_h^0\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)}^2 \\ &\quad - 2k\omega_0 \|\mathbf{v}_h^0\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)} + C_1 k \|\mathbf{v}_h^0\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)} + \tilde{C}_\pi k^2 \|\mathbf{v}_h^0\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)}^2. \end{aligned} \quad (5.18)$$

Wieder wenden wir die Young'sche Ungleichung (Lemma A.13)

$$C_1 k \|\mathbf{v}_h^0\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)} \leq k\omega_0 \|\mathbf{v}_h^0\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)}^2 + \frac{kC_1^2}{4\omega_0}$$

auf Gleichung (5.18) an und erhalten

$$\begin{aligned} C_{\text{ex}} \|\nabla \mathbf{m}_h^1\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)}^2 + k(\omega_0 - \tilde{C}_\pi k) \|\mathbf{v}_h^0\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)}^2 + C_{\text{ex}} k^2 \rho(k) \|\nabla \mathbf{v}_h^0\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)}^2 \\ \leq C_{\text{ex}} \|\nabla \mathbf{m}_h^0\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)}^2 + kC_2. \end{aligned} \quad (5.19)$$

Wir erinnern an die Definition $\omega_0 := \alpha/(1 + k_0 M(k_0)/(2\alpha))$, vgl. Definition 4.23. Aufgrund der Wahl von k_0 so, dass $k_0 \leq \alpha/(3\tilde{C}_\pi)$ und $k_0 M(k_0) \leq \alpha$, gilt

$$\omega_0 - \tilde{C}_\pi k \stackrel{(4.49)}{=} \frac{\alpha}{1 + \frac{k_0 M(k_0)}{2\alpha}} - \tilde{C}_\pi k \geq \frac{2\alpha}{3} - \tilde{C}_\pi k_0 \geq \frac{2\alpha}{3} - \frac{\alpha}{3} = \frac{\alpha}{3} > 0. \quad (5.20)$$

Einsetzen von (5.20) in (5.19) zeigt die Abschätzung

$$\begin{aligned} C_{\text{ex}} \|\nabla \mathbf{m}_h^1\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)}^2 + \frac{\alpha}{3} k \|\mathbf{v}_h^0\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)}^2 + C_{\text{ex}} k^2 \rho(k) \|\nabla \mathbf{v}_h^0\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)}^2 \\ \leq C_{\text{ex}} \|\nabla \mathbf{m}_h^0\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)}^2 + kC_2. \end{aligned} \quad (5.21)$$

Nun summieren wir (5.15) für $n = 1, 2, \dots, j-1$ und addieren (5.21). Auflösen der Teleskopsumme führt schließlich zu

$$\|\nabla \mathbf{m}_h^j\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)}^2 + k \sum_{n=0}^{j-1} \|\mathbf{v}_h^n\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)}^2 + k^2 \rho(k) \sum_{n=0}^{j-1} \|\nabla \mathbf{v}_h^n\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)}^2 \leq C$$

mit einer Konstante $C > 0$, welche nur von $T, |\Omega|, \tilde{C}_f, \tilde{C}_\pi, \alpha, \omega_0, k_0, C_{\text{ex}}$ und \tilde{C}_0 abhängt. Aufgrund der nodalen Projektion (4.88) und $\mathbf{m}_h^0 \in \mathcal{M}_h$ gilt auch $\|\mathbf{m}_h^j\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)}^2 \leq |\Omega|$ für alle $j = 0, \dots, N$, siehe Lemma 3.11. Diese Beobachtung schließt den Beweis. \square

Wir wollen das Nebenprodukt (5.11) des vorhergehenden Beweises festhalten, da wir es später im Beweis von Theorem 5.1(c) in Kapitel 5.2.4 wieder benötigen werden.

Lemma 5.3. *Der Output $(\mathbf{m}_h^n)_{n=0}^N, (\mathbf{v}_h^n)_{n=0}^N$ von Algorithmus 4.34 erfüllt*

$$\begin{aligned} C_{\text{ex}} \|\nabla \mathbf{m}_h^{n+1}\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)}^2 &\leq C_{\text{ex}} \|\nabla \mathbf{m}_h^n\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)}^2 - 2k \langle \omega_{M,k}(\mathbf{m}_h^n) \mathbf{v}_h^n, \mathbf{v}_h^n \rangle_\Omega - C_{\text{ex}} k^2 \rho(k) \|\nabla \mathbf{v}_h^n\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)}^2 \\ &\quad + 3k \langle \boldsymbol{\pi}_h(\mathbf{m}_h^n), \mathbf{v}_h^n \rangle_\Omega - k \langle \boldsymbol{\pi}_h(\mathbf{m}_h^{n-1}), \mathbf{v}_h^n \rangle_\Omega + 2k \langle \mathbf{f}_h, \mathbf{v}_h^n \rangle_\Omega, \end{aligned} \quad (5.22)$$

für alle $n = 0, 1, \dots, N$. \square

Lemma 5.4. Falls $k = \mathbf{o}(\rho(k))$ oder die CFL-Bedingung $k = \mathbf{o}(h)$ erfüllt ist, dann gilt

$$k \|\nabla \mathbf{v}_{hk}^-\|_{\mathbf{L}^2(\Omega_T)} \rightarrow 0 \quad \text{für } h, k \rightarrow 0. \quad (5.23)$$

Beweis. Falls $k = \mathbf{o}(h)$, dann verwenden wir eine inverse Ungleichung (Lemma 3.7) und sehen

$$k \|\nabla \mathbf{v}_{hk}^-\|_{\mathbf{L}^2(\Omega_T)} \leq C \underbrace{kh^{-1}}_{\rightarrow 0} \underbrace{\|\mathbf{v}_{hk}^-\|_{\mathbf{L}^2(\Omega_T)}}_{\substack{(5.7) \\ \leq C}} \rightarrow 0.$$

Gilt hingegen $k = \mathbf{o}(\rho(k))$, dann gilt

$$k^2 \|\nabla \mathbf{v}_{hk}^-\|_{\mathbf{L}^2(\Omega_T)}^2 = k^2 \sum_{n=0}^{N-1} k \|\nabla \mathbf{v}_h^n\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)}^2 = \underbrace{k\rho(k)^{-1}}_{\rightarrow 0} \underbrace{k^2 \rho(k) \sum_{n=0}^{N-1} \|\nabla \mathbf{v}_h^n\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)}^2}_{\substack{(5.7) \\ \leq C}} \rightarrow 0.$$

Das schließt den Beweis. \square

5.2.2. Beweis von Theorem 5.1(a) — Extrahieren konvergenter Teilfolgen

Wir beginnen mit (5.4a)–(5.4c): Dividieren der Abschätzung (3.20) in Lemma 3.14 durch k liefert

$$\left\| \frac{\mathbf{m}_h^{n+1} - \mathbf{m}_h^n}{k} \right\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)} \lesssim \|\mathbf{v}_h^n\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)}. \quad (5.24)$$

Damit gilt für die Zeitableitung

$$\|\partial_t \mathbf{m}_{hk}\|_{\mathbf{L}^2(\Omega_T)}^2 = k \sum_{n=0}^{N-1} \left\| \frac{\mathbf{m}_h^{n+1} - \mathbf{m}_h^n}{k} \right\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)}^2 \stackrel{(5.24)}{\lesssim} k \sum_{n=0}^{N-1} \|\mathbf{v}_h^n\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)}^2 \stackrel{(5.7)}{\leq} C. \quad (5.25)$$

Des Weiteren gilt die in $h, k > 0$ gleichmäßige Beschränktheit

$$\|\mathbf{m}_{hk}\|_{\mathbf{L}^2(0;T;\mathbf{H}^1(\Omega))}^2 \stackrel{(3.1b)}{\leq} T \cdot \max_{0 \leq n \leq N} \|\mathbf{m}_h^n\|_{\mathbf{H}^1(\Omega)}^2 \stackrel{(5.1),(5.7)}{\leq} CT.$$

Folglich sind $(\mathbf{m}_{hk})_{h,k>0} \subset \mathbf{H}^1(\Omega_T)$ und $(\mathbf{v}_{hk})_{h,k>0} \subset \mathbf{L}^2(\Omega_T)$ gleichmäßig beschränkt in $\mathbf{H}^1(\Omega_T)$ respektive $\mathbf{L}^2(\Omega_T)$.

Nun erhalten wir (5.4a) für eine Teilfolge $(\mathbf{m}_{h'k'})_{h',k'>0} \subset (\mathbf{m}_{hk})_{h,k>0}$ durch Anwenden des Satzes von Eberlein–Šmulian (Satz A.6) sowie (5.4b) durch Anwenden des Einbettungssatzes von Rellich (Satz A.5) für dieselbe Teilfolge. Von nun an betrachten wir stets den Output des Algorithmus für diese $h', k' > 0$, verwenden aber aus Gründen der Lesbarkeit die Bezeichnungen $h, k > 0$.

Ebenso erhalten wir (5.4c) für eine Teilfolge $(\mathbf{v}_{h'k'}^-)_{h',k'>0} \subset (\mathbf{v}_{hk}^-)_{h,k>0}$ durch Anwenden des Satzes von Eberlein–Šmulian (Satz A.6). Wieder betrachten wir von nun an nur noch diese Teilfolge des Outputs, verwenden aber weiterhin die Notation $h, k > 0$.

Als Nächstes wollen wir (5.4d) zeigen. Dafür beobachten wir zunächst, dass für alle $n = 0, 1, \dots, N-1$ und alle $t \in [t_n, t_{n+1})$ die Abschätzungen

$$\begin{aligned} |\mathbf{m}_{hk}(t) - \mathbf{m}_{hk}^-(t)| &\stackrel{(3.1a),(3.1b)}{=} \left| \frac{t_{n+1}-t}{t_{n+1}-t_n} \mathbf{m}_h^{n+1} - \frac{t-t_n}{t_{n+1}-t_n} \mathbf{m}_h^n - \frac{t_{n+1}-t_n}{t_{n+1}-t_n} \mathbf{m}_h^n \right| \\ &= (t-t_n) \left| \frac{\mathbf{m}_h^{n+1} - \mathbf{m}_h^n}{k} \right| \leq k |\partial_t \mathbf{m}_{hk}(t)|, \end{aligned}$$

sowie

$$\begin{aligned} |\mathbf{m}_{hk}(t) - \mathbf{m}_{hk}^+(t)| &\stackrel{(3.1a),(3.1b)}{=} \left| \frac{t_{n+1}-t}{t_{n+1}-t_n} \mathbf{m}_h^{n+1} - \frac{t-t_n}{t_{n+1}-t_n} \mathbf{m}_h^n - \frac{t_{n+1}-t_n}{t_{n+1}-t_n} \mathbf{m}_h^{n+1} \right| \\ &= (t_{n+1}-t) \left| \frac{\mathbf{m}_h^{n+1} - \mathbf{m}_h^n}{k} \right| \leq k |\partial_t \mathbf{m}_{hk}(t)| \end{aligned}$$

gelten. Damit folgt

$$\begin{aligned} \|\mathbf{m}_{hk} - \mathbf{m}_{hk}^-\|_{\mathbf{L}^2(\Omega_T)} &\leq k \|\partial_t \mathbf{m}_{hk}\|_{\mathbf{L}^2(\Omega_T)} \stackrel{(5.25)}{\rightarrow} 0, \\ \|\mathbf{m}_{hk} - \mathbf{m}_{hk}^+\|_{\mathbf{L}^2(\Omega_T)} &\leq k \|\partial_t \mathbf{m}_{hk}\|_{\mathbf{L}^2(\Omega_T)} \stackrel{(5.25)}{\rightarrow} 0, \end{aligned}$$

für $h, k \rightarrow 0$. Mit (5.4b) folgt nun (5.4d).

Wir zeigen (5.4e): Es gilt in $\mathbf{L}^2(\Omega_T)$ die in $h, k > 0$ gleichmäßige Beschränktheit

$$\|\nabla \mathbf{m}_{hk}^-\|_{\mathbf{L}^2(\Omega_T)}^2 = \sum_{n=0}^{N-1} k \|\nabla \mathbf{m}_h^n\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)}^2 \stackrel{(5.7)}{\leq} \sum_{n=0}^{N-1} kC = CT.$$

Ebenso gilt die Beschränktheit in $\mathbf{L}^2(\Omega_T)$ auch für $\nabla \mathbf{m}_{hk}^+$:

$$\|\nabla \mathbf{m}_{hk}^+\|_{\mathbf{L}^2(\Omega_T)}^2 = \sum_{n=1}^N k \|\nabla \mathbf{m}_h^n\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)}^2 \stackrel{(5.7)}{\leq} \sum_{n=1}^N kC = CT.$$

Nun erhalten wir durch zweimaliges sukzessives Anwenden des Satzes von Eberlein–Šmulian (Satz A.6) die Existenz einer Teilfolge $(\nabla \mathbf{m}_{h'k'}^-)_{h',k'>0} \subset (\nabla \mathbf{m}_{hk}^-)_{h,k>0}$ respektive $(\nabla \mathbf{m}_{h'k'}^+)_{h',k'>0} \subset (\nabla \mathbf{m}_{hk}^+)_{h,k>0}$, sodass $\nabla \mathbf{m}_{h'k'}^- \rightarrow \mathbf{g}_1 \in \mathbf{L}^2(\Omega_T)$, $\nabla \mathbf{m}_{h'k'}^+ \rightarrow \mathbf{g}_2 \in \mathbf{L}^2(\Omega_T)$ in $\mathbf{L}^2(\Omega_T)$. Wieder verwenden wir $h, k > 0$ anstelle von $h', k' > 0$. Mit denselben Argumenten wie im Beweis von [BFF⁺14, Lemma 3.7] identifizieren wir die Grenzfunktionen $\mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2$: Wir haben bereits gezeigt, dass nach (5.4b) und (5.4d) für diese Teilfolge die Konvergenzen $\mathbf{m}_{hk}, \mathbf{m}_{hk}^-, \mathbf{m}_{hk}^+ \rightarrow \mathbf{m}$ in $\mathbf{L}^2(\Omega_T)$ gelten. Weiter zeigt (5.4a), dass $\nabla \mathbf{m} \in \mathbf{L}^2(\Omega_T)$. Aus der Eindeutigkeit von Limiten folgt nun $\mathbf{g}_1 = \nabla \mathbf{m} = \mathbf{g}_2$ und somit (5.4e).

Wir zeigen (5.4f): Die gleichmäßige Beschränktheit (5.7) von $\|\mathbf{m}_h^n\|_{\mathbf{H}^1(\Omega)}$ impliziert nach (3.1a)–(3.1b) die gleichmäßige Beschränktheit von $\mathbf{m}_{hk}, \mathbf{m}_{hk}^-, \mathbf{m}_{hk}^+$ in $L^\infty(0, T; \mathbf{H}^1(\Omega))$. Sukzessives Anwenden des Satzes von Banach–Alaoglu (Satz A.7) zeigt die Existenz einer Teilfolge $(h_\ell, k_\ell)_{\ell \in \mathbb{N}}$ und einer Funktion $\widetilde{\mathbf{m}} \in L^\infty(0, T; \mathbf{H}^1(\Omega))$, sodass

$$\mathbf{m}_{h_\ell k_\ell}, \mathbf{m}_{h_\ell k_\ell}^-, \mathbf{m}_{h_\ell k_\ell}^+ \xrightarrow{*} \widetilde{\mathbf{m}} \quad \text{in } L^\infty(0, T; \mathbf{H}^1(\Omega)).$$

Da $L^\infty(0, T; \mathbf{H}^1(\Omega)) \subset \mathbf{L}^2(\Omega_T)$, folgt aus (5.4b) und (5.4d) sowie der Eindeutigkeit von Limiten, dass $\widetilde{\mathbf{m}} = \mathbf{m}$ und somit (5.4f).

Wir haben nun eine Teilfolge $(h_\ell, k_\ell)_{\ell \in \mathbb{N}}$ gefunden, sodass die nach (3.1a)–(3.1b) interpolierten Funktionen (5.4a)–(5.4f) simultan erfüllen. Wir bezeichnen Glieder dieser Folge von nun an mit $h, k > 0$ anstelle von h_ℓ, k_ℓ . Es bleibt zu zeigen, dass die Limiten \mathbf{m}, \mathbf{v} auch (5.4g)–(5.4h) erfüllen.

Zunächst zeigen wir die Gleichheit (5.4g): Lemma 3.8 und Lemma 3.15 zeigen

$$\begin{aligned}
 \|\partial_t \mathbf{m}_{hk} - \mathbf{v}_{hk}\|_{\mathbf{L}^1(\Omega_T)} &= \sum_{n=0}^{N-1} k \left\| \frac{\mathbf{m}_h^{n+1} - \mathbf{m}_h^n}{k} - \mathbf{v}_h^n \right\|_{\mathbf{L}^1(\Omega)} \\
 &\stackrel{(3.9)}{\lesssim} \sum_{n=0}^{N-1} kh^3 \sum_{\mathbf{z}_h \in \mathcal{N}_h} \left| \frac{\mathbf{m}_h^{n+1}(\mathbf{z}_h) - \mathbf{m}_h^n(\mathbf{z}_h)}{k} - \mathbf{v}_h^n(\mathbf{z}_h) \right| \\
 &\stackrel{(3.22)}{\lesssim} \sum_{n=0}^{N-1} kh^3 \sum_{\mathbf{z}_h \in \mathcal{N}_h} k |\mathbf{v}_h^n(\mathbf{z}_h)|^2 \\
 &\stackrel{(3.9)}{\lesssim} k^2 \sum_{n=0}^{N-1} \|\mathbf{v}_h^n\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)}^2 \stackrel{(5.7)}{\leq} Ck \rightarrow 0 \quad \text{für } k \rightarrow 0.
 \end{aligned}$$

Nun folgt $\partial_t \mathbf{m} = \mathbf{v}$ fast überall in Ω_T mit (5.4a) und (5.4c).

Es bleibt (5.4h) zu zeigen, wofür wir wie in [Rug16, Beweis von Proposition 4.3.11, Step 3] vorgehen: Sei $(t, \mathbf{x}) \in \Omega_T$ beliebig. Sei $K \in \mathcal{T}_h$ so gewählt, dass $\mathbf{x} \in K$ und $\mathbf{z}_h \in \mathcal{N}_h(K)$. Es gilt $|\mathbf{m}_{hk}^-(t, \mathbf{z}_h)| = 1$ und $\nabla \mathbf{m}_{hk}^-(t)$ ist konstant in K , da $\mathbf{m}_{hk}^-(t) \in \mathcal{S}^1(\mathcal{T}_h)^3$. Wir rechnen

$$\begin{aligned}
 \left| 1 - |\mathbf{m}_{hk}^-(t, \mathbf{x})| \right| &= \left| |\mathbf{m}_{hk}^-(t, \mathbf{z}_h)| - |\mathbf{m}_{hk}^-(t, \mathbf{x})| \right| \\
 &\leq |\mathbf{m}_{hk}^-(t, \mathbf{z}_h) - \mathbf{m}_{hk}^-(t, \mathbf{x})| \leq h_K |\nabla \mathbf{m}_{hk}^-(t)|_K,
 \end{aligned}$$

woraus $\|1 - |\mathbf{m}_{hk}^-|\|_{L^2(K)} \leq h_K \|\nabla \mathbf{m}_{hk}^-\|_{L^2(K)}$ folgt. Nun folgt

$$\begin{aligned}
 \|1 - |\mathbf{m}_{hk}^-|\|_{L^2(\Omega_T)}^2 &= \sum_{n=0}^{N-1} k \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \|1 - |\mathbf{m}_h^n|\|_{L^2(K)}^2 \\
 &\leq \sum_{n=0}^{N-1} k \sum_{K \in \mathcal{T}_h} h_K^2 \|\nabla \mathbf{m}_h^n\|_{L^2(K)}^2 \leq h^2 \|\nabla \mathbf{m}_{hk}^-\|_{L^2(\Omega_T)}^2 \rightarrow 0
 \end{aligned}$$

für $h, k \rightarrow 0$. Nun folgt (5.4h) aus (5.4b) und der Dreiecksungleichung. \square

5.2.3. Beweis von Theorem 5.1(b) — Identifizieren der Grenzfunktion

Dass \mathbf{m} die Nebenbedingung aus Definition 2.2(i) erfüllt, haben wir bereits gezeigt, vgl. (5.4h). Wir zeigen, dass auch Definition 2.2(iii) gilt: Nach (5.4a) gilt $\mathbf{m}_{hk} \rightharpoonup \mathbf{m}$ in $\mathbf{H}^1(\Omega_T)$. Da der Spuroperator stetig ist, folgt $\mathbf{m}_{hk}(0) \rightharpoonup \mathbf{m}(0)$ in $\mathbf{H}^{1/2}(\Omega)$, siehe Satz A.8. Nach Voraussetzung (5.5a) gilt $\mathbf{m}_{hk}(0) = \mathbf{m}_h^0 \rightharpoonup \mathbf{m}^0$ in $\mathbf{H}^1(\Omega)$. Aufgrund der Eindeutigkeit von

Limiten und $\mathbf{H}^1(\Omega) \subset \mathbf{H}^{1/2}(\Omega)$ schließen wir $\mathbf{m}(0) = \mathbf{m}^0$ im Sinne des Spurooperators. Es bleibt Definition 2.2(ii) zu zeigen: Seien $\varphi \in \mathbf{C}^\infty(\overline{\Omega_T})$ und $t \in [0, T]$ beliebig. Für $n = 0, 1, \dots, N-1$ mit $t_n \leq t < t_{n+1}$ wählen wir $\mathcal{I}_h(\mathbf{m}_h^n \times \varphi(t)) \in \mathcal{K}_h(\mathbf{m}_h^n)$ als Testfunktion in Gleichung (4.87) und erhalten

$$\begin{aligned}
 & \langle \omega_{M,k}(\mathbf{m}_h^n) \mathbf{v}_h^n, \mathcal{I}_h(\mathbf{m}_h^n \times \varphi(t)) \rangle_\Omega + \langle \mathbf{m}_h^n \times \mathbf{v}_h^n, \mathcal{I}_h(\mathbf{m}_h^n \times \varphi(t)) \rangle_\Omega \\
 & \quad + \frac{C_{\text{ex}} k}{2} (1 + \rho(k)) \langle \nabla \mathbf{v}_h^n, \nabla \mathcal{I}_h(\mathbf{m}_h^n \times \varphi(t)) \rangle_\Omega \\
 & = -C_{\text{ex}} \langle \nabla \mathbf{m}_h^n, \nabla \mathcal{I}_h(\mathbf{m}_h^n \times \varphi(t)) \rangle_\Omega + \langle \mathbf{f}_h, \mathcal{I}_h(\mathbf{m}_h^n \times \varphi(t)) \rangle_\Omega \\
 & \quad + \frac{3}{2} \langle \boldsymbol{\pi}_h(\mathbf{m}_h^n), \mathcal{I}_h(\mathbf{m}_h^n \times \varphi(t)) \rangle_\Omega - \frac{1}{2} \langle \boldsymbol{\pi}_h(\mathbf{m}_h^{n-1}), \mathcal{I}_h(\mathbf{m}_h^n \times \varphi(t)) \rangle_\Omega,
 \end{aligned} \tag{5.26}$$

für $n = 1, 2, \dots, N-1$ und aufgrund der notationellen Konvention (4.89) auch für $n = 0$, siehe Bemerkung 4.37. Integrieren von (5.26) von $t = t_n$ bis $t = t_{n+1}$ und Summieren der entstehenden Gleichungen für $n = 0, 1, \dots, N-1$ liefert

$$\begin{aligned}
 & \int_0^T \langle \omega_{M,k}(\mathbf{m}_{hk}^-) \mathbf{v}_{hk}^-, \mathcal{I}_h(\mathbf{m}_{hk}^- \times \varphi) \rangle_\Omega dt + \int_0^T \langle \mathbf{m}_{hk}^- \times \mathbf{v}_{hk}^-, \mathcal{I}_h(\mathbf{m}_{hk}^- \times \varphi) \rangle_\Omega dt \\
 & \quad + \frac{C_{\text{ex}} k}{2} (1 + \rho(k)) \int_0^T \langle \nabla \mathbf{v}_{hk}^-, \nabla \mathcal{I}_h(\mathbf{m}_{hk}^- \times \varphi) \rangle_\Omega dt \\
 & = -C_{\text{ex}} \int_0^T \langle \nabla \mathbf{m}_{hk}^-, \nabla \mathcal{I}_h(\mathbf{m}_{hk}^- \times \varphi) \rangle_\Omega dt + \int_0^T \langle \mathbf{f}_h, \mathcal{I}_h(\mathbf{m}_{hk}^- \times \varphi) \rangle_\Omega dt \\
 & \quad + \frac{3}{2} \int_0^T \langle \boldsymbol{\pi}_h(\mathbf{m}_{hk}^-), \mathcal{I}_h(\mathbf{m}_{hk}^- \times \varphi) \rangle_\Omega dt - \frac{1}{2} \int_0^T \langle \boldsymbol{\pi}_h(\mathbf{m}_{hk}^-), \mathcal{I}_h(\mathbf{m}_{hk}^- \times \varphi) \rangle_\Omega dt,
 \end{aligned} \tag{5.27}$$

wobei $\boldsymbol{\pi}_h(\mathbf{m}_{hk}^-)$ gemäß Definition (3.1a) und (4.89) für $\boldsymbol{\pi}_h(\mathbf{m}_h^{-1})$ steht wenn $t \in [0, k)$. Lemma A.9 besagt, dass in einem Hilbert-Raum die Folge der Skalarprodukte der Folgenglieder einer stark und einer schwach konvergenten Folge selbst in \mathbb{R} gegen das Skalarprodukt der Grenzfunktionen konvergiert. Damit folgt aus den Voraussetzungen (5.5b)–(5.5c) und (5.4b)–(5.4c), dass

$$\begin{aligned}
 & \int_0^T \langle \mathbf{m}_{hk}^- \times \mathbf{v}_{hk}^-, \mathcal{I}_h(\mathbf{m}_{hk}^- \times \varphi) \rangle_\Omega dt \rightarrow \int_0^T \langle \mathbf{m} \times \mathbf{v}, \mathbf{m} \times \varphi \rangle_\Omega dt \\
 & \quad \int_0^T \langle \mathbf{f}_h, \mathcal{I}_h(\mathbf{m}_{hk}^- \times \varphi) \rangle_\Omega dt \rightarrow \int_0^T \langle \mathbf{f}, \mathbf{m} \times \varphi \rangle_\Omega dt \\
 & \quad \frac{1}{2} \int_0^T \langle 3\boldsymbol{\pi}_h(\mathbf{m}_{hk}^-) - \boldsymbol{\pi}_h(\mathbf{m}_{hk}^-), \mathcal{I}_h(\mathbf{m}_{hk}^- \times \varphi) \rangle_\Omega dt \rightarrow \int_0^T \langle \boldsymbol{\pi}(\mathbf{m}), \mathbf{m} \times \varphi \rangle_\Omega dt,
 \end{aligned} \tag{5.28}$$

für $h, k \rightarrow 0$. Die verbleibenden Terme betrachten wir einzeln. Zunächst wollen wir

$$\int_0^T \langle \omega_{M,k}(\mathbf{m}_{hk}^-) \mathbf{v}_{hk}^-, \mathcal{I}_h(\mathbf{m}_{hk}^- \times \varphi) \rangle_\Omega dt \rightarrow \alpha \int_0^T \langle \mathbf{v}, \mathbf{m} \times \varphi \rangle_\Omega dt. \tag{5.29}$$

für $h, k \rightarrow 0$ zeigen: Wir verwenden die Dreiecksungleichung und erhalten

$$\begin{aligned} & \left| \int_0^T \langle \omega_{M,k}(\mathbf{m}_{hk}^-) \mathbf{v}_{hk}^-, \mathcal{I}_h(\mathbf{m}_{hk}^- \times \boldsymbol{\varphi}) \rangle_\Omega dt - \alpha \int_0^T \langle \mathbf{v}, \mathbf{m} \times \boldsymbol{\varphi} \rangle_\Omega dt \right| \\ & \leq \left| \int_0^T \langle \omega_{M,k}(\mathbf{m}_{hk}^-) \mathbf{v}_{hk}^-, \mathbf{m}_{hk}^- \times \boldsymbol{\varphi} \rangle_\Omega - \alpha \langle \mathbf{v}, \mathbf{m} \times \boldsymbol{\varphi} \rangle_\Omega dt \right| \\ & \quad + \left| \int_0^T \langle \omega_{M,k}(\mathbf{m}_{hk}^-) \mathbf{v}_{hk}^-, (\mathcal{I} - \mathcal{I}_h)(\mathbf{m}_{hk}^- \times \boldsymbol{\varphi}) \rangle_\Omega dt \right|. \end{aligned}$$

Der erste Term auf der rechten Seite verschwindet für $h, k \rightarrow 0$ mit Lemma A.9, da einerseits (4.52) zusammen mit (5.4c) impliziert, dass $\omega_{M,k}(\mathbf{m}_{hk}^-) \mathbf{v}_{hk}^- \rightarrow \alpha \mathbf{v}$ in $\mathbf{L}^2(\Omega_T)$ für $h, k \rightarrow 0$, und andererseits (5.4b) impliziert, dass $\mathbf{m}_{hk}^- \times \boldsymbol{\varphi} \rightarrow \mathbf{m} \times \boldsymbol{\varphi}$ in $\mathbf{L}^2(\Omega_T)$ für $h, k \rightarrow 0$. Für den zweiten Term auf der rechten Seite verwenden wir die Cauchy–Schwarz’sche Ungleichung sowie $|\omega_{M,k}(\cdot)| \leq \alpha + kM(k)$ nach Lemma 4.22. Es folgt, dass $|\omega_{M,k}(\cdot)|$ gleichmäßig beschränkt ist, da $kM(k) \rightarrow 0$ für $h, k \rightarrow 0$ nach Voraussetzung. Damit sehen wir

$$\begin{aligned} \left| \int_0^T \langle \omega_{M,k}(\mathbf{m}_{hk}^-) \mathbf{v}_{hk}^-, (\mathcal{I} - \mathcal{I}_h)(\mathbf{m}_{hk}^- \times \boldsymbol{\varphi}) \rangle_\Omega dt \right| & \lesssim \|\mathbf{v}_{hk}^-\|_{\mathbf{L}^2(\Omega_T)} \|(\mathcal{I} - \mathcal{I}_h)(\mathbf{m}_{hk}^- \times \boldsymbol{\varphi})\|_{\mathbf{L}^2(\Omega_T)} \\ & \stackrel{(5.7)}{\lesssim} \|(\mathcal{I} - \mathcal{I}_h)(\mathbf{m}_{hk}^- \times \boldsymbol{\varphi})\|_{\mathbf{L}^2(\Omega_T)} \\ & \stackrel{(3.11)}{\lesssim} h \|\mathbf{m}_{hk}^-\|_{\mathbf{L}^2(0,T;\mathbf{H}^1(\Omega))} \|\boldsymbol{\varphi}\|_{\mathbf{W}^{2,\infty}(\Omega_T)} \\ & \stackrel{(5.7)}{\lesssim} h \|\boldsymbol{\varphi}\|_{\mathbf{W}^{2,\infty}(\Omega_T)} \rightarrow 0 \quad \text{für } h, k \rightarrow 0. \end{aligned}$$

Das zeigt (5.29). Als Nächstes wollen wir

$$\frac{C_{\text{ex}} k}{2} (1 + \rho(k)) \int_0^T \langle \nabla \mathbf{v}_{hk}^-, \nabla \mathcal{I}_h(\mathbf{m}_{hk}^- \times \boldsymbol{\varphi}) \rangle_\Omega dt \rightarrow 0 \quad (5.30)$$

für $h, k \rightarrow 0$ zeigen: Der Faktor $C_{\text{ex}}(1 + \rho(k))/2$ ist beschränkt, da $\rho(k) \rightarrow 0$ für $k \rightarrow 0$. Mit der Dreiecksungleichung folgt nun

$$\begin{aligned} & \frac{C_{\text{ex}}(1 + \rho(k))k}{2} \left| \int_0^T \langle \nabla \mathbf{v}_{hk}^-, \nabla \mathcal{I}_h(\mathbf{m}_{hk}^- \times \boldsymbol{\varphi}) \rangle_\Omega dt \right| \\ & \lesssim k \left| \int_0^T \langle \nabla \mathbf{v}_{hk}^-, \nabla(\mathbf{m}_{hk}^- \times \boldsymbol{\varphi}) \rangle_\Omega dt \right| + k \left| \int_0^T \langle \nabla \mathbf{v}_{hk}^-, \nabla(\mathcal{I} - \mathcal{I}_h)(\mathbf{m}_{hk}^- \times \boldsymbol{\varphi}) \rangle_\Omega dt \right| \\ & \stackrel{(3.11)}{\lesssim} k \|\nabla \mathbf{v}_{hk}^-\|_{\mathbf{L}^2(\Omega_T)} \left(\|\nabla(\mathbf{m}_{hk}^- \times \boldsymbol{\varphi})\|_{\mathbf{L}^2(\Omega_T)} + h \|\mathbf{m}_{hk}^-\|_{\mathbf{L}^2(0,T;\mathbf{H}^1(\Omega))} \|\boldsymbol{\varphi}\|_{\mathbf{W}^{2,\infty}(\Omega_T)} \right) \\ & \stackrel{(5.4)}{\lesssim} k \|\nabla \mathbf{v}_{hk}^-\|_{\mathbf{L}^2(\Omega_T)} \stackrel{(5.23)}{\rightarrow} 0 \quad \text{für } h, k \rightarrow 0. \end{aligned}$$

Das zeigt (5.30). Es bleibt noch

$$C_{\text{ex}} \int_0^T \langle \nabla \mathbf{m}_{hk}^-, \nabla \mathcal{I}_h(\mathbf{m}_{hk}^- \times \boldsymbol{\varphi}) \rangle_\Omega dt \rightarrow C_{\text{ex}} \int_0^T \langle \nabla \mathbf{m}, \nabla(\mathbf{m} \times \boldsymbol{\varphi}) \rangle_\Omega dt \quad (5.31)$$

für $h, k \rightarrow 0$ zu zeigen: Wieder schätzen wir mithilfe der Dreiecksungleichung

$$\begin{aligned}
 & \left| \int_0^T \langle \nabla \mathbf{m}_{hk}^-, \nabla \mathcal{I}_h(\mathbf{m}_{hk}^- \times \varphi) \rangle_\Omega dt - \int_0^T \langle \nabla \mathbf{m}, \nabla(\mathbf{m} \times \varphi) \rangle_\Omega dt \right| \\
 & \leq \left| \int_0^T \langle \nabla \mathbf{m}_{hk}^-, \nabla(\mathbf{m}_{hk}^- \times \varphi) \rangle_\Omega dt - \int_0^T \langle \nabla \mathbf{m}, \nabla(\mathbf{m} \times \varphi) \rangle_\Omega dt \right| \\
 & \quad + \left| \int_0^T \langle \nabla \mathbf{m}_{hk}^-, \nabla(\mathcal{I} - \mathcal{I}_h)(\mathbf{m}_{hk}^- \times \varphi) \rangle_\Omega dt \right|
 \end{aligned} \tag{5.32}$$

ab. Wir untersuchen den ersten Term auf der rechten Seite: Mit (A.11) kann der erste Term auf der rechten Seite von (5.32) geschrieben werden als

$$\left| \int_0^T \langle \nabla \mathbf{m}_{hk}^-, \mathbf{m}_{hk}^- \times \nabla \varphi \rangle_\Omega dt - \int_0^T \langle \nabla \mathbf{m}, \mathbf{m} \times \nabla \varphi \rangle_\Omega dt \right|. \tag{5.33}$$

Weiter impliziert einerseits (5.4d), dass $\mathbf{m}_{hk}^- \times \nabla \varphi \rightarrow \mathbf{m} \times \nabla \varphi$ in $L^2(\Omega_T)$ und andererseits gilt $\nabla \mathbf{m}_{hk}^- \rightarrow \nabla \mathbf{m}$ in $L^2(\Omega_T)$, siehe (5.4e). Damit können wir Lemma A.9 anwenden. Insgesamt, folgt in Kombination mit (5.33), dass der erste Term auf der rechten Seite von (5.32) für $h, k \rightarrow 0$ verschwindet

$$\begin{aligned}
 & \left| \int_0^T \langle \nabla \mathbf{m}_{hk}^-, \nabla(\mathbf{m}_{hk}^- \times \varphi) \rangle_\Omega dt - \int_0^T \langle \nabla \mathbf{m}, \nabla(\mathbf{m} \times \varphi) \rangle_\Omega dt \right| \\
 & \stackrel{(5.33)}{=} \left| \int_0^T \langle \nabla \mathbf{m}_{hk}^-, \mathbf{m}_{hk}^- \times \nabla \varphi \rangle_\Omega dt - \int_0^T \langle \nabla \mathbf{m}, \mathbf{m} \times \nabla \varphi \rangle_\Omega dt \right| \stackrel{(A.3)}{\rightarrow} 0 \quad \text{für } h, k \rightarrow 0.
 \end{aligned}$$

Für den zweiten Term auf der rechten Seite von (5.32) zeigen die Cauchy–Schwarz’sche Ungleichung und Lemma 3.9, dass

$$\begin{aligned}
 & \left| \int_0^T \langle \nabla \mathbf{m}_{hk}^-, \nabla(\mathcal{I} - \mathcal{I}_h)(\mathbf{m}_{hk}^- \times \varphi) \rangle_\Omega dt \right| \\
 & \leq \|\mathbf{m}_{hk}^-\|_{L^2(0,T;\mathbf{H}^1(\Omega))} \|(\mathcal{I} - \mathcal{I}_h)(\mathbf{m}_{hk}^- \times \varphi)\|_{L^2(0,T;\mathbf{H}^1(\Omega))} \\
 & \stackrel{(3.11)}{\lesssim} h \|\mathbf{m}_{hk}^-\|_{L^2(0,T;\mathbf{H}^1(\Omega))} \|\mathbf{m}_{hk}^-\|_{L^2(0,T;\mathbf{H}^1(\Omega))} \|\varphi\|_{\mathbf{W}^{2,\infty}(\Omega_T)} \\
 & \stackrel{(5.7)}{\lesssim} h \|\varphi\|_{\mathbf{W}^{2,\infty}(\Omega_T)} \rightarrow 0 \quad \text{für } h, k \rightarrow 0.
 \end{aligned}$$

Kombinieren von (5.27)–(5.31) zeigt nun

$$\begin{aligned}
 & \alpha \int_0^T \langle \mathbf{v}, \mathbf{m} \times \varphi \rangle_\Omega dt + \int_0^T \langle \mathbf{m} \times \mathbf{v}, \mathbf{m} \times \varphi \rangle_\Omega dt \\
 & = -C_{\text{ex}} \int_0^T \langle \nabla \mathbf{m}, \nabla(\mathbf{m} \times \varphi) \rangle_\Omega dt + \int_0^T \langle \mathbf{f}, \mathbf{m} \times \varphi \rangle_\Omega dt + \int_0^T \langle \boldsymbol{\pi}(\mathbf{m}), \mathbf{m} \times \varphi \rangle_\Omega dt
 \end{aligned} \tag{5.34}$$

Ausnutzen elementarer Eigenschaften des Kreuzprodukts liefert die Identitäten

$$\begin{aligned}
\langle \mathbf{v}, \mathbf{m} \times \boldsymbol{\varphi} \rangle_{\Omega} &\stackrel{(A.6)}{=} -\langle \mathbf{m} \times \mathbf{v}, \boldsymbol{\varphi} \rangle_{\Omega}, \\
\langle \mathbf{m} \times \mathbf{v}, \mathbf{m} \times \boldsymbol{\varphi} \rangle_{\Omega} &\stackrel{(A.6)}{=} -\langle \mathbf{m} \times (\mathbf{m} \times \mathbf{v}), \boldsymbol{\varphi} \rangle_{\Omega} \stackrel{(A.7)}{=} -\langle (\mathbf{m} \cdot \mathbf{v})\mathbf{m} - (\mathbf{m} \cdot \mathbf{m})\mathbf{v}, \boldsymbol{\varphi} \rangle_{\Omega} = \langle \mathbf{v}, \boldsymbol{\varphi} \rangle_{\Omega}, \\
\langle \nabla \mathbf{m}, \nabla(\mathbf{m} \times \boldsymbol{\varphi}) \rangle_{\Omega} &\stackrel{(A.11)}{=} \langle \nabla \mathbf{m}, \mathbf{m} \times \nabla \boldsymbol{\varphi} \rangle_{\Omega} \stackrel{(A.6)}{=} -\langle \mathbf{m} \times \nabla \mathbf{m}, \nabla \boldsymbol{\varphi} \rangle_{\Omega}, \\
\langle \mathbf{f}, \mathbf{m} \times \boldsymbol{\varphi} \rangle_{\Omega} &\stackrel{(A.6)}{=} -\langle \mathbf{m} \times \mathbf{f}, \boldsymbol{\varphi} \rangle_{\Omega}, \\
\langle \boldsymbol{\pi}(\mathbf{m}), \mathbf{m} \times \boldsymbol{\varphi} \rangle_{\Omega} &\stackrel{(A.6)}{=} -\langle \mathbf{m} \times \boldsymbol{\pi}(\mathbf{m}), \boldsymbol{\varphi} \rangle_{\Omega}.
\end{aligned}$$

Wir setzen diese Identitäten in (5.34) ein. Da die Wahl von $\boldsymbol{\varphi} \in \mathbf{C}^{\infty}(\overline{\Omega_T})$ beliebig war, folgt insgesamt, dass \mathbf{m}, \mathbf{v} die Gleichung

$$\begin{aligned}
\int_0^T \langle \mathbf{v}, \boldsymbol{\varphi} \rangle_{\Omega} dt &= C_{\text{ex}} \int_0^T \langle \mathbf{m} \times \nabla \mathbf{m}, \nabla \boldsymbol{\varphi} \rangle_{\Omega} dt \\
&\quad - \int_0^T \langle \mathbf{m} \times \mathbf{f}, \boldsymbol{\varphi} \rangle_{\Omega} dt - \int_0^T \langle \mathbf{m} \times \boldsymbol{\pi}(\mathbf{m}), \boldsymbol{\varphi} \rangle_{\Omega} dt + \alpha \int_0^T \langle \mathbf{m} \times \mathbf{v}, \boldsymbol{\varphi} \rangle_{\Omega} dt
\end{aligned}$$

für alle $\boldsymbol{\varphi} \in \mathbf{C}^{\infty}(\overline{\Omega_T})$ erfüllen. Gemeinsam mit (5.4g) und einem Dichtheitsargument ($\mathbf{C}^{\infty}(\overline{\Omega_T}) \cap \mathbf{H}^1(\Omega_T)$ liegt dicht in $\mathbf{H}^1(\Omega_T)$) folgt nun, dass \mathbf{m} die schwache Formulierung (2.5) erfüllt. \square

5.2.4. Beweis von Theorem 5.1(c) — Energiegleichung der Grenzfunktion

Es bleibt die Energiegleichung 2.2(iv) zu zeigen: Sei $\tau \in (0, T)$ beliebig. Wähle j so, dass $\tau \in [t_{j-1}, t_j)$. Nach Definition der Energie (2.3) gilt für alle $0 \leq n \leq j-1$

$$\begin{aligned}
\mathcal{E}(\mathbf{m}_h^{n+1}) - \mathcal{E}(\mathbf{m}_h^n) &= \frac{C_{\text{ex}}}{2} (\|\nabla \mathbf{m}_h^{n+1}\|_{L^2(\Omega)}^2 - \|\nabla \mathbf{m}_h^n\|_{L^2(\Omega)}^2) \\
&\quad - \frac{1}{2} \langle \boldsymbol{\pi}(\mathbf{m}_h^{n+1}), \mathbf{m}_h^{n+1} \rangle_{\Omega} + \frac{1}{2} \langle \boldsymbol{\pi}(\mathbf{m}_h^n), \mathbf{m}_h^n \rangle_{\Omega} - \langle \mathbf{f}, \mathbf{m}_h^{n+1} - \mathbf{m}_h^n \rangle_{\Omega} \\
&\stackrel{(5.22)}{\leq} -k \langle \omega_{M,k}(\mathbf{m}_h^n) \mathbf{v}_h^n, \mathbf{v}_h^n \rangle_{\Omega} - \frac{C_{\text{ex}} k^2 \rho(k)}{2} \|\nabla \mathbf{v}_h^n\|_{L^2(\Omega)}^2 \\
&\quad + \frac{3k}{2} \langle \boldsymbol{\pi}_h(\mathbf{m}_h^n), \mathbf{v}_h^n \rangle_{\Omega} - \frac{k}{2} \langle \boldsymbol{\pi}_h(\mathbf{m}_h^{n-1}), \mathbf{v}_h^n \rangle_{\Omega} + k \langle \mathbf{f}_h, \mathbf{v}_h^n \rangle_{\Omega} \\
&\quad - \frac{1}{2} \langle \boldsymbol{\pi}(\mathbf{m}_h^{n+1}), \mathbf{m}_h^{n+1} \rangle_{\Omega} + \frac{1}{2} \langle \boldsymbol{\pi}(\mathbf{m}_h^n), \mathbf{m}_h^n \rangle_{\Omega} - \langle \mathbf{f}, \mathbf{m}_h^{n+1} - \mathbf{m}_h^n \rangle_{\Omega} \\
&=: RHS.
\end{aligned}$$

Wieder verstehen wir $\pi_h(\mathbf{m}_h^{n-1})$ im Sinne von Bemerkung 4.37 für $n = 0$. Durch Umordnen der Terme und Ausnutzen der Selbstadjungiertheit von π kann die rechte Seite als

$$\begin{aligned}
 RHS &= -k \langle \omega_{M,k}(\mathbf{m}_h^n) \mathbf{v}_h^n, \mathbf{v}_h^n \rangle_\Omega - \frac{C_{\text{ex}} k^2 \rho(k)}{2} \|\nabla \mathbf{v}_h^n\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)}^2 \\
 &\quad - \langle \pi(\mathbf{m}_h^n), \mathbf{m}_h^{n+1} - \mathbf{m}_h^n - k \mathbf{v}_h^n \rangle_\Omega - \langle \mathbf{f}, \mathbf{m}_h^{n+1} - \mathbf{m}_h^n - k \mathbf{v}_h^n \rangle_\Omega \\
 &\quad - \frac{1}{2} \langle \pi(\mathbf{m}_h^{n+1} - \mathbf{m}_h^n), \mathbf{m}_h^{n+1} - \mathbf{m}_h^n \rangle_\Omega + \frac{k}{2} \langle \pi(\mathbf{m}_h^n - \mathbf{m}_h^{n-1}), \mathbf{v}_h^n \rangle_\Omega \\
 &\quad + \frac{3k}{2} \langle (\pi_h - \pi)(\mathbf{m}_h^n), \mathbf{v}_h^n \rangle_\Omega - \frac{k}{2} \langle (\pi_h - \pi)(\mathbf{m}_h^{n-1}), \mathbf{v}_h^n \rangle_\Omega + k \langle \mathbf{f}_h - \mathbf{f}, \mathbf{v}_h^n \rangle_\Omega
 \end{aligned} \tag{5.35}$$

geschrieben werden. Wir schätzen die Terme folgendermaßen ab: Der zweite Term ist negativ und wird vernachlässigt. Für den dritten Term verwenden wir die Hölder'sche Ungleichung (Lemma A.2), Voraussetzung (5.6), sowie Lemma 3.13 und sehen

$$\begin{aligned}
 |\langle \pi(\mathbf{m}_h^n), \mathbf{m}_h^{n+1} - \mathbf{m}_h^n - k \mathbf{v}_h^n \rangle_\Omega| &\leq \|\pi(\mathbf{m}_h^n)\|_{\mathbf{L}^3(\Omega)} \|\mathbf{m}_h^{n+1} - \mathbf{m}_h^n - k \mathbf{v}_h^n\|_{\mathbf{L}^{3/2}(\Omega)} \\
 &\stackrel{(5.6), (3.15)}{\lesssim} k^2 \|\mathbf{m}_h^n\|_{\mathbf{L}^\infty(\Omega)} \left(\|\mathbf{v}_h^n\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)}^2 + \|\mathbf{v}_h^n\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)} \|\nabla \mathbf{v}_h^n\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)} \right).
 \end{aligned} \tag{5.36}$$

Mit analoger Argumentation sehen wir auch

$$\begin{aligned}
 |\langle \mathbf{f}, \mathbf{m}_h^{n+1} - \mathbf{m}_h^n - k \mathbf{v}_h^n \rangle_\Omega| &\leq \|\mathbf{f}\|_{\mathbf{L}^3(\Omega)} \|\mathbf{m}_h^{n+1} - \mathbf{m}_h^n - k \mathbf{v}_h^n\|_{\mathbf{L}^{3/2}(\Omega)} \\
 &\stackrel{(3.15)}{\lesssim} k^2 \|\mathbf{f}\|_{\mathbf{L}^3(\Omega)} \left(\|\mathbf{v}_h^n\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)}^2 + \|\mathbf{v}_h^n\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)} \|\nabla \mathbf{v}_h^n\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)} \right).
 \end{aligned} \tag{5.37}$$

Stetigkeit von π und Lemma 3.14 zeigen

$$|\langle \pi(\mathbf{m}_h^{n+1} - \mathbf{m}_h^n), \mathbf{m}_h^{n+1} - \mathbf{m}_h^n \rangle_\Omega| \stackrel{(3.20)}{\lesssim} k^2 \|\mathbf{v}_h^n\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)}^2 \tag{5.38}$$

und

$$k |\langle \pi(\mathbf{m}_h^n - \mathbf{m}_h^{n-1}), \mathbf{v}_h^n \rangle_\Omega| \stackrel{(3.20)}{\lesssim} k^2 \|\mathbf{v}_h^{n-1}\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)} \|\mathbf{v}_h^n\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)}, \tag{5.39}$$

wobei wir anmerken, dass (5.39) nicht für $n = 0$ gilt. Dort haben wir die Ungleichung

$$k |\langle \pi(\mathbf{m}_h^0 - \mathbf{m}_h^{-1}), \mathbf{v}_h^0 \rangle_\Omega| \stackrel{(4.91)}{\lesssim} k^2 \|\mathbf{v}_h^0\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)}^2, \tag{5.40}$$

siehe Bemerkung 4.37. Kombinieren der Ungleichungen (5.36)–(5.40) führt nun auf

$$\begin{aligned}
 &\mathcal{E}(\mathbf{m}_h^{n+1}) - \mathcal{E}(\mathbf{m}_h^n) + k \langle \omega_{M,k}(\mathbf{m}_h^n) \mathbf{v}_h^n, \mathbf{v}_h^n \rangle_\Omega \\
 &\leq C k^2 \|\mathbf{v}_h^n\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)} (\|\mathbf{v}_h^n\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)} + \|\nabla \mathbf{v}_h^n\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)} + \|\mathbf{v}_h^{\max\{n-1, 0\}}\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)}) \\
 &\quad + \frac{3k}{2} \langle (\pi_h - \pi)(\mathbf{m}_h^n), \mathbf{v}_h^n \rangle_\Omega - \frac{k}{2} \langle (\pi_h - \pi)(\mathbf{m}_h^{n-1}), \mathbf{v}_h^n \rangle_\Omega + k \langle \mathbf{f}_h - \mathbf{f}, \mathbf{v}_h^n \rangle_\Omega,
 \end{aligned} \tag{5.41}$$

für $n = 0, 1, \dots, j-1$. Summieren dieser Ungleichungen für $n = 0, 1, \dots, j-1$ und Auflösen der Teleskopsumme auf der linken Seite zeigt

$$\begin{aligned}
& \mathcal{E}(\mathbf{m}_{hk}^+(\tau)) - \mathcal{E}(\mathbf{m}_{hk}^-(0)) + \int_0^{\tau_j} \langle \omega_{M,k}(\mathbf{m}_{hk}^-) \mathbf{v}_{hk}^-, \mathbf{v}_{hk}^- \rangle_{\Omega} dt \\
& \leq Ck \int_0^{\tau_j} \|\mathbf{v}_{hk}^-\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)}^2 dt + Ck \int_0^{\tau_j} \|\mathbf{v}_{hk}^-\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)} \|\nabla \mathbf{v}_{hk}^-\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)} dt \\
& \quad + \frac{3}{2} \int_0^{\tau_j} \langle (\boldsymbol{\pi}_h - \boldsymbol{\pi})(\mathbf{m}_{hk}^-), \mathbf{v}_{hk}^- \rangle_{\Omega} dt - \frac{1}{2} \int_0^{\tau_j} \langle (\boldsymbol{\pi}_h - \boldsymbol{\pi})(\mathbf{m}_{hk}^-), \mathbf{v}_{hk}^- \rangle_{\Omega} dt \\
& \quad + \int_0^{\tau_j} \langle \mathbf{f}_h - \mathbf{f}, \mathbf{v}_{hk}^- \rangle_{\Omega} dt .
\end{aligned} \tag{5.42}$$

Nun wollen wir beginnend mit den Termen auf der rechten Seite den Grenzübergang $h, k \rightarrow 0$ durchführen: Beschränktheit von \mathbf{v}_{hk}^- in $\mathbf{L}^2(\Omega_T)$, siehe (5.7), impliziert Konvergenz des ersten Terms auf der rechten Seite gegen 0 für $h, k \rightarrow 0$. Für den zweiten Term auf der rechten Seite verwenden wir (5.7) und die Cauchy–Schwarz’sche Ungleichung. Dies zeigt

$$k \int_0^{\tau_j} \|\mathbf{v}_{hk}^-\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)} \|\nabla \mathbf{v}_{hk}^-\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)} dt \leq k \|\mathbf{v}_{hk}^-\|_{\mathbf{L}^2(\Omega_T)} \|\nabla \mathbf{v}_{hk}^-\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)} \xrightarrow{(5.7), (5.23)} 0 \quad \text{für } h, k \rightarrow 0.$$

Kombinieren der Cauchy–Schwarz’schen Ungleichung, (5.7) und der Voraussetzung, dass (5.5b) und (5.5c) mit starker Konvergenz gelten, zeigt, dass die übrigen Terme auf der rechten Seite ebenfalls gegen 0 konvergieren für $h, k \rightarrow 0$. Betrachten wir nun die Terme auf der linken Seite: Es gilt $\mathcal{E}(\mathbf{m}_h^0) \rightarrow \mathcal{E}(\mathbf{m}(0))$, da $\mathbf{m}_h^0 \rightarrow \mathbf{m}(0)$ in $\mathbf{H}^1(\Omega)$ für $h \rightarrow 0$ nach Voraussetzung. Weiter gilt, da $\mathcal{E}(\cdot)$ und $\|\cdot\|_{\mathbf{L}^2(0,\tau;\mathbf{L}^2(\Omega))}$ schwach unterhalbstetig sind (vgl. Lemma A.10), dass für alle messbaren $I \subset [0, T]$,

$$\begin{aligned}
& \int_I \left(\mathcal{E}(\mathbf{m}(\tau)) + \alpha \|\mathbf{v}\|_{\mathbf{L}^2(0,\tau;\mathbf{L}^2(\Omega))}^2 \right) d\tau \\
& \leq \liminf_{h,k \rightarrow 0} \int_I \left(\mathcal{E}(\mathbf{m}_{hk}^+(\tau)) + \|\omega_{M,k}^{1/2}(\mathbf{m}_{hk}^-) \mathbf{v}_{hk}^-\|_{\mathbf{L}^2(0,\tau;\mathbf{L}^2(\Omega))}^2 \right) d\tau,
\end{aligned} \tag{5.43}$$

da $\omega_{M,k}^{1/2}(\mathbf{m}_{hk}^-) \mathbf{v}_{hk}^- \rightharpoonup \alpha^{1/2} \mathbf{v}$ in $\mathbf{L}^2(\Omega_T)$ nach Lemma 4.22 und (5.4c). Insgesamt führt (5.42) auf

$$\int_I \left(\mathcal{E}(\mathbf{m}(\tau)) - \mathcal{E}(\mathbf{m}(0)) + \alpha \|\mathbf{v}\|_{\mathbf{L}^2(0,\tau;\mathbf{L}^2(\Omega))}^2 \right) d\tau \leq 0.$$

Da $I \subset [0, T]$ eine beliebige messbare Menge war, erhalten wir

$$\mathcal{E}(\mathbf{m}(\tau)) + \alpha \|\mathbf{v}\|_{\mathbf{L}^2(0,\tau;\mathbf{L}^2(\Omega))}^2 \leq \mathcal{E}(\mathbf{m}(0))$$

punktweise für fast alle $\tau \in (0, T)$. Es gilt $\mathbf{v} = \partial_t \mathbf{m}$, siehe (5.4g). Das schließt den Beweis. \square

5.3. Konvergenzordnung

Zunächst wollen wir uns überlegen, wie die als Input unseres effizienten Tangent-Plane-Integrators (Algorithmus 4.34) benötigten Funktionen $M(\cdot)$ und $\rho(\cdot)$ zu wählen sind, sodass wir Konvergenz (beinahe) zweiter Ordnung in der Zeit erhoffen können.

Bemerkung 5.5. *Die Gewichtsfunktion $\omega_{M,k}(\cdot)$ hängt von der Wahl der Funktion $M: \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}^+$ ab. Falls die Voraussetzungen (4.47) an $M: \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}^+$ erfüllt sind, beweist Satz 5.1 Konvergenz gegen eine schwache Lösung der LLG-Gleichung. Jedoch sind unserer Analysis nach die Voraussetzungen (4.47) nicht hinreichend, sodass wir Konvergenz zweiter Ordnung in der Zeit erwarten können. Wir wollen uns überlegen, wie man $M: \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}^+$ wählen kann, sodass sowohl die Voraussetzungen (4.47) erfüllt sind, als auch Konvergenz zweiter Ordnung zu erwarten ist.*

(i) *Eine mögliche Wahl ist die konstante Funktion $M: k \mapsto M_0$ für ein $M_0 \in \mathbb{R}^+$. In Bemerkung 4.25 haben wir uns überlegt, dass für formale Konvergenz zweiter Ordnung $M_0 \in \mathbb{R}^+$ so groß gewählt werden muss, dass*

$$\limsup_{h,k \rightarrow 0} \max_{0 \leq n \leq N} \|\mathbf{h}_{\text{eff}}(\mathbf{m}_h^n) \cdot \mathbf{m}_h^n\|_{L^\infty(\Omega)} \leq M_0. \quad (5.44)$$

Da der Wert auf der linken Seite von (5.44) aber im Allgemeinen unbekannt ist, kommt die Strategie, eine konstante Funktion zu wählen, bestenfalls als Hit-Or-Miss Strategie infrage.

(ii) *Falls die linke Seite von (5.44) endlich (aber unbekannt) ist, fordern wir $\lim_{k \rightarrow 0} M(k) = \infty$ zusätzlich zu den Voraussetzungen (4.47). Dann existiert ein $k_0 > 0$ so, dass*

$$\limsup_{h,k \rightarrow 0} \max_{0 \leq n \leq N} \|\mathbf{h}_{\text{eff}}(\mathbf{m}_h^n) \cdot \mathbf{m}_h^n\|_{L^\infty(\Omega)} \leq M(k_0). \quad (5.45)$$

Lemma 4.21 zeigt dann, dass wir für alle $k \leq k_0$ Konvergenz zweiter Ordnung in der Zeit erwarten können.

(iii) *Mögliche Wahlen für solche Funktionen sind zum Beispiel $M: k \mapsto k^{-\lambda}$ für ein $\lambda \in (0, 1)$. Die kanonische Wahl für die Funktion $M: \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}^+$, sodass sowohl (4.47) als auch $\lim_{k \rightarrow 0} M(k) = \infty$ erfüllt sind, ist $M: k \mapsto 1/|k \log(k)|$.*

Mit der Analysis aus Kapitel 4 können wir für unseren effizienten Tangent-Plane-Integrator (Algorithmus 4.34) Konvergenz beinahe zweiter Ordnung in der Zeit gegen eine Lösung von LLG erhoffen, wenn wir die Stabilisierung $\rho(\cdot)$ entsprechend der folgenden Bemerkung 5.6(iv) wählen. Wenn wir die CFL-Bedingung $k = \mathbf{o}(h)$ fordern, können wir hingegen Konvergenz echt zweiter Ordnung in der Zeit erwarten.

Bemerkung 5.6. (i) *Nach Bemerkung 4.27(i) erwarten wir formale Konvergenz zweiter Ordnung in der Zeit nur, falls $\rho(k) = \mathbf{o}(k)$.*

(ii) *Nur falls $k = \mathbf{o}(\rho(k))$, können wir die Konvergenzaussage von Theorem 5.1 ohne CFL-Bedingung beweisen (vgl. Lemma 5.4).*

(iii) *Nach (i)–(ii) ist es nicht möglich, die Stabilisierung $\rho(\cdot)$ so zu wählen, dass das Verfahren formal exakt zweiter Ordnung in der Zeit und unbedingt konvergent ist.*

(iv) *Nun ist die kanonische Wahl $\rho(k) := |k \log k|$. Diese Wahl führt auf unbedingte Konvergenz und wir erwarten beinahe zweite Ordnung, d.h. $k\rho(k) = \mathcal{O}(k^{2-\varepsilon})$ für jedes $\varepsilon > 0$.*

Die Konvergenz (beinahe) zweiter Ordnung ist jedoch nicht rigoros bewiesen: Das klassische Vorgehen um Konvergenz p -ter Ordnung eines Zeitschrittverfahrens rigoros zu beweisen, basiert im Wesentlichen auf zwei Bestandteilen:

1. Man zeigt, dass der Konsistenzfehler pro Zeitschritt durch $\mathcal{O}(k^{p+1})$ kontrolliert wird.
2. Man leitet eine Rekurrenzrelation her, welche die Fehlerfortpflanzung beschreibt.

Wir haben in Proposition 4.16 gezeigt, dass der Konsistenzfehler pro Zeitschritt (beinahe) kubisch in k ist. Wir können die erhoffte Konvergenz (beinahe) zweiter Ordnung jedoch nicht rigoros beweisen, wie es beispielsweise in [Tho06] für die Wärmeleitungsgleichung gemacht wird. Der Grund dafür ist, dass wir hier — im Gegensatz zum Crank–Nicolson-Verfahren für die Wärmeleitungsgleichung — aufgrund der punktwisen Projektion

$$\mathbf{m}(t+k) := \frac{\mathbf{m}(t) + k\mathbf{v}(t)}{|\mathbf{m}(t) + k\mathbf{v}(t)|}$$

auf \mathbb{S}^2 in jedem Zeitschritt, keine explizite von $\mathbf{m}(t)$ und $\mathbf{m}(t+k)$ abhängige Darstellung von $\mathbf{v}(t)$ erhalten. Genau so eine explizite Darstellung wird jedoch im entsprechenden Beweis für die Wärmeleitungsgleichung ausgenutzt, um die benötigte Rekurrenzrelation zu zeigen. Da wir keine Rekurrenzrelation für unser Verfahren zur Verfügung haben, können wir die Beweisstrategie für die Konvergenzordnung des Crank–Nicolson-Verfahrens für die Wärmeleitungsgleichung nicht auf unser Zeitschrittverfahren übertragen.

Diese Problematik betrifft nicht nur unseren effizienten Tangent-Plane-Integrator oder den Integrator aus [AKST14] und wird auch nicht durch die Modifikation (4.30) von $\mathbf{v}(t)$ induziert: Bereits für die Tangent-Plane-Integratoren aus [AJ06, BKP08, Alo08], die einen quadratischen Konsistenzfehler aufweisen, ist Konvergenz erster Ordnung in der Zeit nicht rigoros bewiesen.

Dennoch liefert der kubische Konsistenzfehler im Vergleich zum quadratischen Konsistenzfehler beim θ -Schema (Algorithmus 4.6) das Potential für ein Verfahren höherer Ordnung. Experiment 4.10 sowie Experiment 4.36 und das Experiment aus [AKST14, Section 7.1] bestätigen die erhofften Konvergenzraten der verschiedenen Integratoren, und deuten darauf hin, dass die Beweisschwierigkeit lediglich technischer Natur ist.

6. Implementierung

Um die Ergebnisse unserer Analysis numerisch zu verifizieren, haben wir die in Kapitel 4 vorgestellten Algorithmen implementiert.

6.1. Software

Für das Assemblieren der Finite-Element-Matrizen und das Meshing verwenden wir die C++ Bibliothek Netgen/NGSolve [Sch]. Insbesondere das Python Interface ermöglicht dort eine intuitive symbolische Definition von Linear- und Bilinearformen.

Zur Berechnung des Streufelds mittels Algorithmus 2.3 verwenden wir Netgen/NGSolve (für den Finite-Element-Teil), sowie die C++ Bibliothek BEM++ [SBA⁺15] (für den Rand-Element-Teil).

Um diese zwei Softwarepakete aneinander zu koppeln (d.h. Einschränken von Triangulierungen und Funktionen von Ω auf $\partial\Omega$), verwenden wir das von Alexander Rieder im Zuge seiner Dissertation [Rie17] entworfene Python Modul `pyngbem`.

Zur Visualisierung von Triangulierungen (siehe z.B. Abbildung 6.1) und Magnetisierungen (siehe z.B. Abbildung 6.2) verwenden wir das Open-Source-Programm ParaView [AGL05].

6.2. Lösen der linearen Gleichungssysteme

Einen grundlegenden Aspekt numerischer Integratoren stellt das Lösen linearer Gleichungssysteme dar.

Berechnung des Streufelds mit Algorithmus 2.3

Zu gegebenem $\psi_h \in \mathbf{V}_h$, verwenden wir Algorithmus 2.3 um $\mathbf{h}_{s,h}(\psi_h) \approx \mathbf{h}_s(\psi_h)$ zu berechnen. Dort ist in jedem Schritt (i)–(iii) ein lineares Gleichungssystem zu lösen.

Für das lineare Gleichungssystem in (i) verwenden wir den CG-Solver mit (Block-) Jacobi Preconditioner aus NGSolve. Um die $L^2(\partial\Omega)$ -Orthogonalprojektion in (ii) zu berechnen, verwenden wir GMRES aus SciPy [com] ohne Preconditioner durch das BEM++ Python Interface. Das Poisson-Problem mit inhomogenen Dirichlet-Daten aus (iii) lösen wir mit einem direkten PARDISO-Solver in NGSolve.

Direktes Lösen im Tangentialraum

In jedem Zeitschritt $n = 1, 2, \dots, N - 1$ von Algorithmus 4.87 müssen wir ein Gleichungssystem folgender Form lösen: Finde $\mathbf{v}_h^n \in \mathcal{K}_h(\mathbf{m}_h^n)$ so, dass

$$a(\mathbf{m}_h^n; \mathbf{v}_h^n, \boldsymbol{\varphi}_h) = F(\mathbf{m}_h^n, \mathbf{m}_h^{n-1}; \boldsymbol{\varphi}_h) \text{ für alle } \boldsymbol{\varphi}_h \in \mathcal{K}_h(\mathbf{m}_h^n). \quad (6.1)$$

Wir bezeichnen die Anzahl der Knoten unserer Triangulierung \mathcal{T}_h mit $K := \#\mathcal{N}_h$ und die kanonische Basis unseres Finite-Element-Raums $\mathbf{V}_h = (\mathcal{S}^1(\mathcal{T}_h))^3 \subset \mathbf{H}^1(\Omega)$ bestehend aus Hutfunktionen mit $\varphi_h^1, \varphi_h^2, \dots, \varphi_h^{3K} \in \mathbf{V}_h$.

In der Implementierung assemblieren wir zunächst das Gleichungssystem (6.1) für den Lösungs- und Testraum \mathbf{V}_h der Dimension $3K$, d.h. wir assemblieren die Matrix $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{3K \times 3K}$ und den Vektor $\mathbf{r} \in \mathbb{R}^{3K}$, welche

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_{jk} &= a(\mathbf{m}_h^n; \varphi_h^k, \varphi_h^j) && \text{für alle } j, k \in \{1, \dots, 3K\} \text{ und} \\ \mathbf{r}_k &= F(\mathbf{m}_h^n, \mathbf{m}_h^{n-1}; \varphi_h^k) && \text{für alle } k \in \{1, \dots, 3K\} \end{aligned}$$

erfüllen. Tatsächlich wollen wir (6.1) aber für den Lösungs- und Testraum $\mathcal{K}_h(\mathbf{m}_h^n) \subsetneq \mathbf{V}_h$ lösen. Da für $\varphi_h \in \mathcal{K}_h(\mathbf{m}_h^n)$ die Orthogonalität $\mathbf{m}_h^n(\mathbf{z}_h) \cdot \varphi_h(\mathbf{z}_h) = 0$ für alle $\mathbf{z}_h \in \mathcal{N}_h$ gilt, lautet $\dim \mathcal{K}_h(\mathbf{m}_h^n) = 2K$ und (6.1) definiert effektiv nur $2K$ Gleichungen für $\mathbf{v}_h^n \in \mathcal{K}_h(\mathbf{m}_h^n)$.

In [Rug16, Chapter 6.1.2] wird explizit die Konstruktion einer Matrix $\mathbf{Q} \in \mathbb{R}^{2K \times 3K}$ beschrieben, sodass das Lösen von (6.1) auf das Lösen des $2K \times 2K$ Systems

$$(\mathbf{Q}\mathbf{A}\mathbf{Q}^\top)\mathbf{u} = \mathbf{Q}\mathbf{r} \tag{6.2}$$

zurückgeführt werden kann. Anschließend definiert man $\boldsymbol{\lambda} := \mathbf{Q}^\top \mathbf{u} \in \mathbb{R}^{3K}$ und erhält die Lösung von (6.1) durch

$$\mathbf{v}_h^n := \sum_{k=1}^{3K} \lambda^k \varphi_h^k.$$

Die Konstruktion der Matrix $\mathbf{Q} \in \mathbb{R}^{2K \times 3K}$ ist geometrisch motiviert und beruht auf der Idee, in jedem Knoten $\mathbf{z}_k \in \mathcal{N}_h$, $k = 1, \dots, K$, die kanonische Basis $\{\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3\}$ des \mathbb{R}^3 mittels einer Rotationsmatrix \mathbf{R}_k in eine Orthonormalbasis $\{\mathbf{R}_k^\top \mathbf{e}_1, \mathbf{R}_k^\top \mathbf{e}_2, \mathbf{R}_k^\top \mathbf{e}_3\}$ mit $\mathbf{R}_k^\top \mathbf{e}_3 = \mathbf{m}_h^n(\mathbf{z}_k)$ zu überführen. Die Matrix $\mathbf{Q} \in \mathbb{R}^{2K \times 3K}$ hat dann Blockstruktur

$$\begin{pmatrix} \mathbf{Q}_1 & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{Q}_2 & \ddots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \ddots & \ddots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} & \mathbf{Q}_K \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{2K \times 3K},$$

mit $\mathbf{Q}_k^\top = (\mathbf{R}_k^\top \mathbf{e}_1, \mathbf{R}_k^\top \mathbf{e}_2) \in \mathbb{R}^{3 \times 2}$ für $k = 1, \dots, K$. Insbesondere wird in [Rug16, Proposition 6.1.3] gezeigt, dass das Lösen von (6.2) äquivalent zum Lösen von (6.1) ist. In der Implementierung stellen wir die Matrix $\mathbf{Q} \in \mathbb{R}^{2K \times 3K}$ wie in [Rug16, Section 6.1.2] beschrieben auf und Lösen (6.2) mit GMRES aus SciPy [com] ohne Preconditioner.

Iteratives Lösen im Tangentialraum

Falls eine Simulation Streufeld-Effekte berücksichtigt, müsste man $\mathbf{h}_{s,h}(\varphi_h^k)$ für alle $k \in \{1, \dots, 3K\}$ berechnen, um die Matrix \mathbf{A} aus (6.2) zu assemblieren. Des Weiteren wäre diese Matrix nicht schwach-besetzt, da das Streufeld nichtlokal ist. Insgesamt ist diese Herangehensweise nicht praktikabel. Stattdessen lösen wir das Gleichungssystem (4.85) im Preprocessing-Schritt von Algorithmus 4.34 iterativ.

Algorithmus 6.1. Input: Approximation $\mathbf{m}_h^0 \in \mathcal{M}_h$ des Anfangsdatums \mathbf{m}^0 und Toleranz $\tau > 0$. Definiere $\ell := 1$ und $\boldsymbol{\eta}_h^0 := \mathbf{0}$.

Loop: Iteriere die folgenden Schritte (a)–(b):

(a) Finde $\boldsymbol{\eta}_h^\ell \in \mathcal{K}_h(\mathbf{m}_h^0)$, sodass für alle $\boldsymbol{\varphi}_h \in \mathcal{K}_h(\mathbf{m}_h^0)$

$$\begin{aligned} & \langle \omega_{M,k}(\mathbf{m}_h^0) \boldsymbol{\eta}_h^\ell, \boldsymbol{\varphi}_h \rangle_\Omega + \langle \mathbf{m}_h^0 \times \boldsymbol{\eta}_h^\ell, \boldsymbol{\varphi}_h \rangle_\Omega + \frac{C_{ex} k}{2} (1 + \rho(k)) \langle \nabla \boldsymbol{\eta}_h^\ell, \nabla \boldsymbol{\varphi}_h \rangle_\Omega \\ & = -C_{ex} \langle \nabla \mathbf{m}_h^0, \nabla \boldsymbol{\varphi}_h \rangle_\Omega + \langle \boldsymbol{\pi}_h(\mathbf{m}_h^0), \boldsymbol{\varphi}_h \rangle_\Omega + \langle \mathbf{f}_h, \boldsymbol{\varphi}_h \rangle_\Omega + \frac{k}{2} \langle \boldsymbol{\pi}_h(\boldsymbol{\eta}_h^{\ell-1}), \boldsymbol{\varphi}_h \rangle_\Omega. \end{aligned}$$

(b) Terminiere, falls $\|\boldsymbol{\eta}_h^\ell - \boldsymbol{\eta}_h^{\ell-1}\|_{L^2(\Omega)} \leq \tau$. Sonst, gehe zu (a) und definiere $\ell := \ell + 1$.

Output: Approximation $\boldsymbol{\eta}_h^\ell \approx \mathbf{v}_h^0$.

Bemerkung 6.2. (i) In [DPP⁺17, Section 5] zeigen wir mit einem Fixpunktargument, dass Algorithmus 6.1 nach endlich vielen Schritten terminiert.

(ii) Für das Lösen im diskreten Tangentialraum in Schritt (a) gehen wir wie im vorhergehenden Abschnitt beschrieben, vor.

(iii) Analog lösen wir bei der Implementierung von Algorithmus 4.28 das Gleichungssystem (4.72) für \mathbf{v}_h^n in jedem Zeitschritt $n = 0, 1, \dots, N - 1$ iterativ.

6.3. Testen der Implementierung — Standardproblem μ MAG #4

Da im Allgemeinen für LLG keine analytischen Lösungen bekannt sind, ist es nicht-trivial eine Implementierung auf Korrektheit zu überprüfen. Um dieser Problematik entgegenzuwirken, hat die Micromagnetic Modeling Activity Group (μ MAG) des National Institute of Standards and Technology (NIST) [mmag] in Gaithersburg (Maryland, USA) Standard-Probleme entwickelt, um Forschern die Möglichkeit zu geben, ihre Algorithmen und Implementierungen zu testen und zu vergleichen.

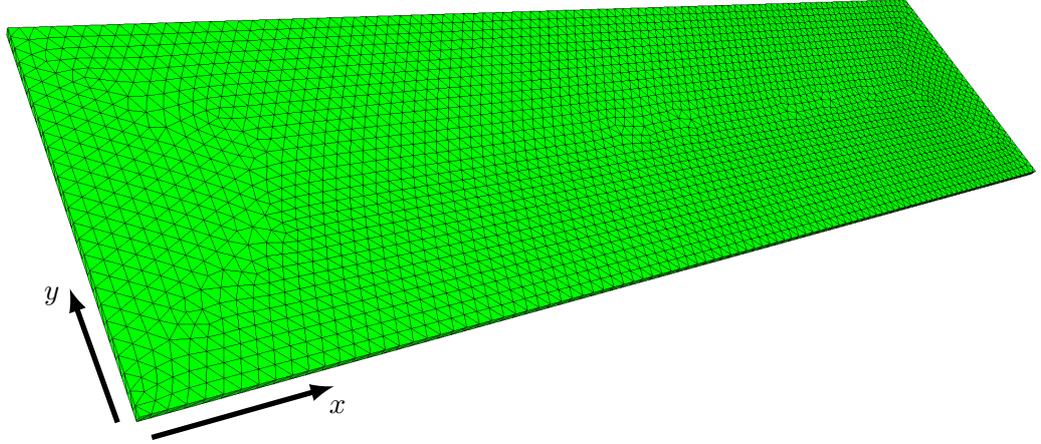
Spezifikation

Wir testen unsere Implementierung des effizienten Tangent-Plane-Integrators (Algorithmus 4.34) für das μ MAG Standard-Problem #4. In diesem Problem wird die Umkehrung der Magnetisierung in einem dünnen Film $\tilde{\Omega}$ mit Materialeigenschaften ähnlich Permalloy simuliert. Die Abmessungen des Gebiets sind $500\text{nm} \times 125\text{nm} \times 3\text{nm}$. Das Problem ist für die Gilbert-Formulierung (mit physikalischen Einheiten)

$$\begin{aligned} \partial_t \mathbf{M} &= -\gamma_0 \mathbf{M} \times \mathbf{H}_{\text{eff}} + \frac{\alpha}{M_s} \mathbf{M} \times \partial_t \mathbf{M} && \text{in } (0, T) \times \tilde{\Omega}, \\ \partial_n \mathbf{M} &= \mathbf{0} && \text{auf } (0, T) \times \partial \tilde{\Omega}, \\ \mathbf{M}(0) &= \mathbf{M}^0 && \text{auf } \tilde{\Omega}, \end{aligned}$$

mit dem effektiven Feld

$$\mathbf{H}_{\text{eff}} := \frac{2A}{\mu_0 M_s^2} \Delta \mathbf{M} + \boldsymbol{\pi}(\mathbf{M}) + \mathbf{F} \quad \text{mit } \boldsymbol{\pi}(\mathbf{M}) := \mathbf{H}_s(\mathbf{M}),$$

Abbildung 6.1.: μMAG #4: Triangulierung \mathcal{T}_h von Ω .

gestellt. Wie in [PRS17, Chapter 6.2] verwenden wir Großbuchstaben um diese Formulierung von der dimensionslosen Form (2.1) zu unterscheiden. Hier steht $\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7} \text{ N/A}^2$ für die Permeabilität im Vakuum, das skalierte gyromagnetische Verhältnis beträgt $\gamma_0 = 2.211 \cdot 10^5 \text{ m/(A s)}$ und die materialabhängigen Parameter sind die Magnetisierungslänge $M_s = 8 \cdot 10^5 \text{ A/m}$, die Austausch-Steifigkeitskonstante $A = 1.3 \cdot 10^{-11} \text{ J/m}$ und der vorgeschlagene Gilbert-Dämpfungskoeffizient $\alpha = 0.02$. Die Simulation soll Streufeld-Effekte berücksichtigen und Anisotropie vernachlässigen. Wir gehen wie in [PRS17, Chapter 6.2] vor, um die Problemstellung auf die dimensionslose Gilbert-Formulierung (2.1) zu skalieren: Mit dem räumlichen Skalierungsparameter $L = 1 \cdot 10^{-9}$ und den Konstanten

$$C_{\text{ex}} := \frac{2A}{\mu_0 M_s^2 L^2} \quad \text{sowie} \quad C_{\text{ani}} := 0$$

erfüllt $\mathbf{m} := \mathbf{M}/M_s$ die dimensionslose Form (2.1) von LLG auf dem skalierten Gebiet $\Omega := (-250, 250) \times (-62.5, 62.5) \times (-1.5, 1.5)$. Ebenso wie die Länge der Magnetisierung wird das externe Feld \mathbf{F} mittels $\mathbf{f} := \mathbf{F}/M_s$ auf unser dimensionsloses Setting skaliert.

Diskretisierung

Wir diskretisieren die Geometrie durch eine Triangulierung \mathcal{T}_h (siehe Abbildung 6.1) mit maximalem Elementdurchmesser $h = 5 \text{ nm}$ erzeugt in Netgen [Sch]. Die generierte Triangulierung besteht aus 17 127 Tetraedern, respektive 5963 Knoten. Für die Zeitdiskretisierung verwenden wir eine uniforme Schrittweite von $k = 0.1 \text{ ps}$. Wir verwenden zur Simulation unsere Implementierung von Algorithmus 4.34. Die auftretenden linearen Gleichungssysteme lösen wir wie in Abschnitt 6.2 beschrieben mit einer Genauigkeit von $\tau = 10^{-8}$.

Anfangsbedingung

Der Anfangszustand \mathbf{m}^0 ist der sogenannte *s-state*: Wie in der Problemstellung vorgeschlagen, generieren wir diesen Zustand durch Anlegen eines langsam abklingenden externen

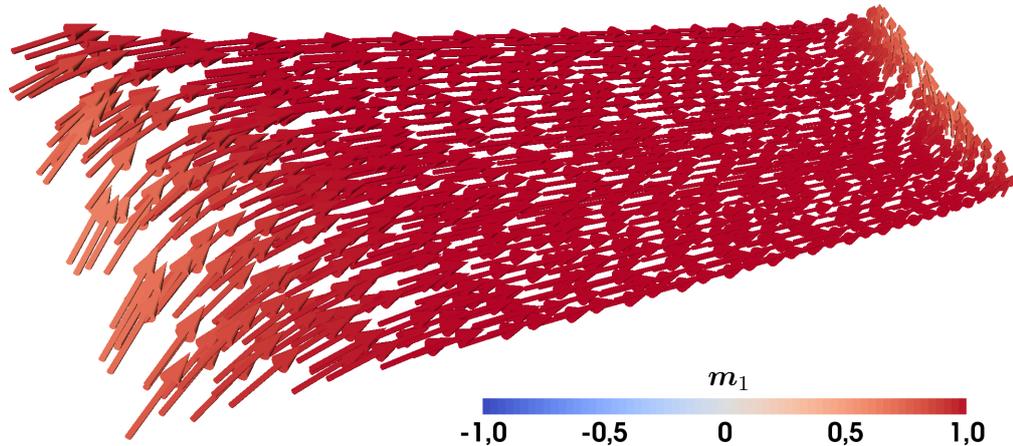


Abbildung 6.2.: μMAG #4: Equilibrium s-state \mathbf{m}_h^0 bei $t = 0$ ps.

Felds \mathbf{F} in Richtung $(1, 1, 1)$. Als Anfangswert dafür wählen wir $\mathbf{m}^{00} \equiv (1, 0, 0)$ und $\alpha = 1$ für maximale Dämpfung. Die Stärke des angelegten Felds wählen wir so, dass zu Beginn $\mu_0|\mathbf{F}| = 30 \cdot 10^{-3}$ T. Diese Stärke liegt in derselben Größenordnung wie jene des später zur Umkehrung der Magnetisierung verwendeten Felds. Über einen Zeitraum von 1 ns lassen wir dieses Feld linear abklingen, sodass dann $|\mathbf{F}| = 0$ gilt. Wir merken an, dass die Analysis in dieser Arbeit nicht-konstante externe Felder wie dieses linear abklingende Feld nicht berücksichtigt — In unserer Arbeit [DPP⁺17] lassen wir allgemeineres als das spezielle in (2.2) betrachtete effektive Feld zu. Dort verallgemeinern wir den Algorithmus sowie die Analysis so, dass unter anderem auch $\mathbf{f} \in C^1(0, T; \mathbf{L}^2(\Omega))$ abgedeckt wird. Anschließend relaxieren wir den erhaltenen Zustand für 1 ns, d.h. wir simulieren die Entwicklung der Magnetisierung ohne extern angelegtes Feld. Diese Dauer ist ausreichend, sodass sich ein stabiler Zustand, der gesuchte s-state \mathbf{m}^0 (Abbildung 6.2), etabliert.

Umkehrung der Magnetisierung

Ausgehend von dem relaxierten s-state \mathbf{m}^0 simulieren wir nun die Umkehrung der Magnetisierung unter dem angelegten Feld $\mathbf{F} = (24.6, 4.3, 0)\mu_0^{-1}10^{-3}$ T. Das entspricht einer Feldstärke, sodass $\mu_0|\mathbf{F}| \approx 25 \cdot 10^{-3}$ T. Abbildung 6.3 und Abbildung 6.4 zeigen, dass eine Dauer von $T = 3$ ns ausreicht um die Umkehrung zu simulieren. Abbildung 6.5 zeigt die Magnetisierung zu jenem Zeitpunkt, an dem die durchschnittliche Magnetisierung in x -Richtung verschwindet. In Abbildung 6.6 ist der Endzustand der Magnetisierung zu sehen.

Vergleich mit anderen Integratoren

Zum Vergleich mit anderen Integratoren wird die zeitliche Entwicklung der über Ω gemittelten Werte der x -, y - und z -Komponente der Magnetisierung herangezogen. Wir vergleichen unser Ergebnis für die durchschnittliche Magnetisierung mit jenem des Finite-Differenzen-Codes 00MMF [DP99], welches auf der μMAG Homepage [mmag] verfügbar ist. Dort wird eine uniforme Triangulierung bestehend aus achsenparallelen Würfeln der Kantenlänge 1 nm

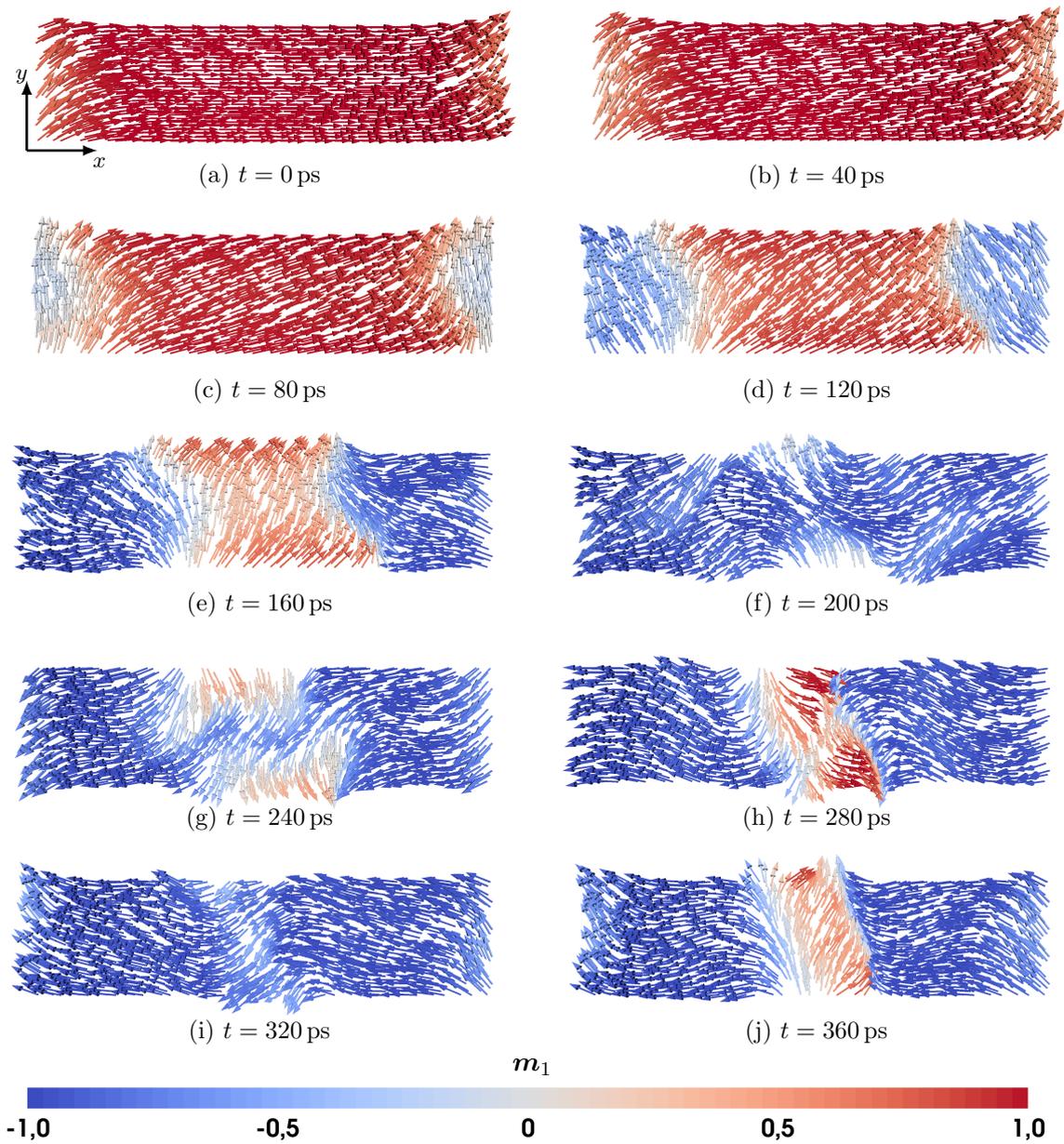


Abbildung 6.3.: μ MAG #4: Magnetisierung zu verschiedenen Zeitpunkten. Ansicht von oben.

verwendet. Das entspricht 187 500 Würfeln, respektive 252 504 Knoten. Die Zeitschrittweite $k \leq 0.2$ ps wird dort adaptiv gesteuert. Der auf [mmag] zur Verfügung gestellte Datensatz stellt einen Auszug ihrer Simulation dar und zeigt, dass der tatsächlich vom Algorithmus gewählte Zeitschritt zwischen 14 fs und 50 fs liegt. Trotz der verschiedenen Lösungsansätze und der deutlich größeren Diskretisierung, die wir wählen, zeigt Abbildung 6.7, dass die Ergebnisse gut übereinstimmen.

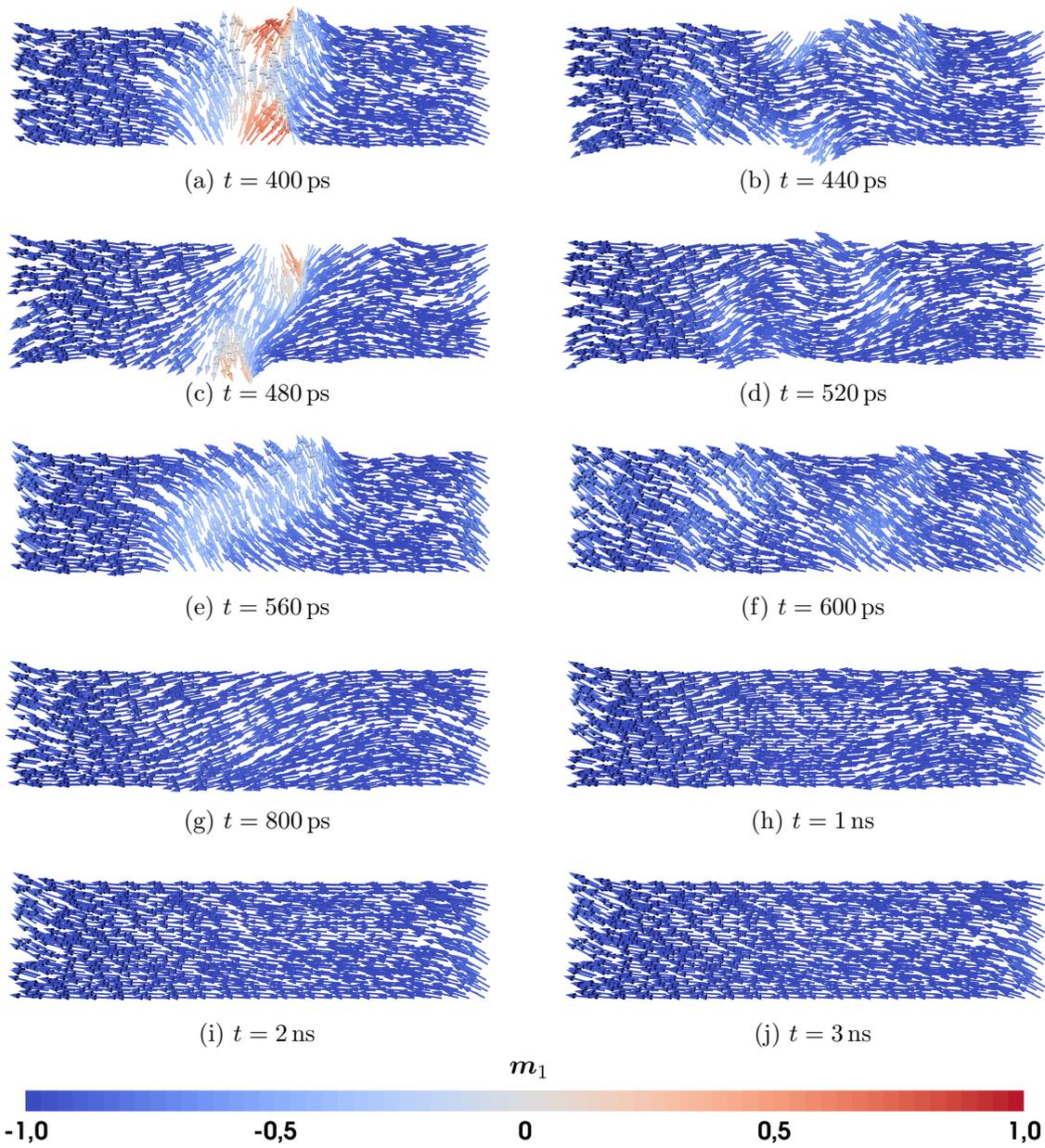


Abbildung 6.4.: μ MAG #4: Magnetisierung zu verschiedenen Zeitpunkten. Ansicht von oben. Fortsetzung von Abbildung 6.3.

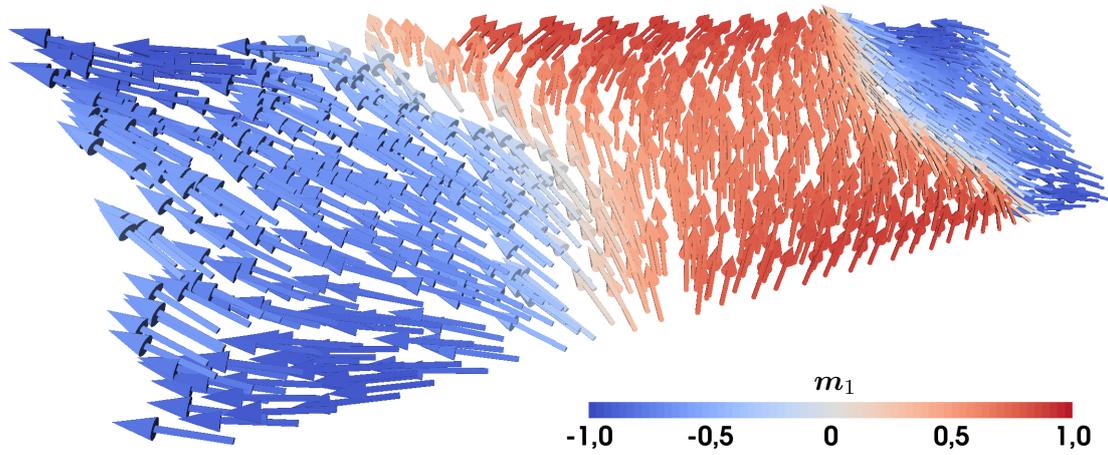


Abbildung 6.5.: $\mu\text{MAG \#4}$: $t = 136.4$ ps; Die x -Komponente der durchschnittlichen Magnetisierung verschwindet.

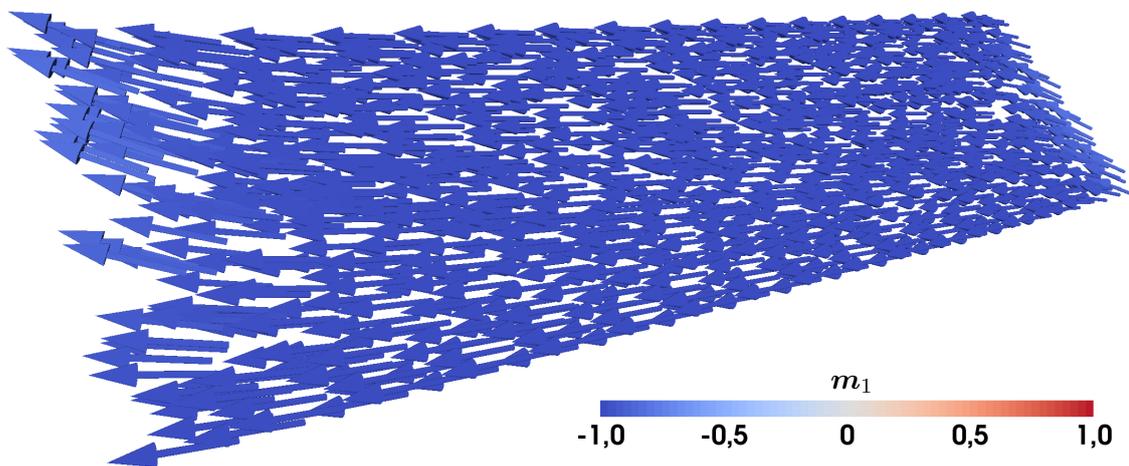


Abbildung 6.6.: $\mu\text{MAG \#4}$: $t = 3$ ns; Die Umkehrung der Magnetisierung ist abgeschlossen.

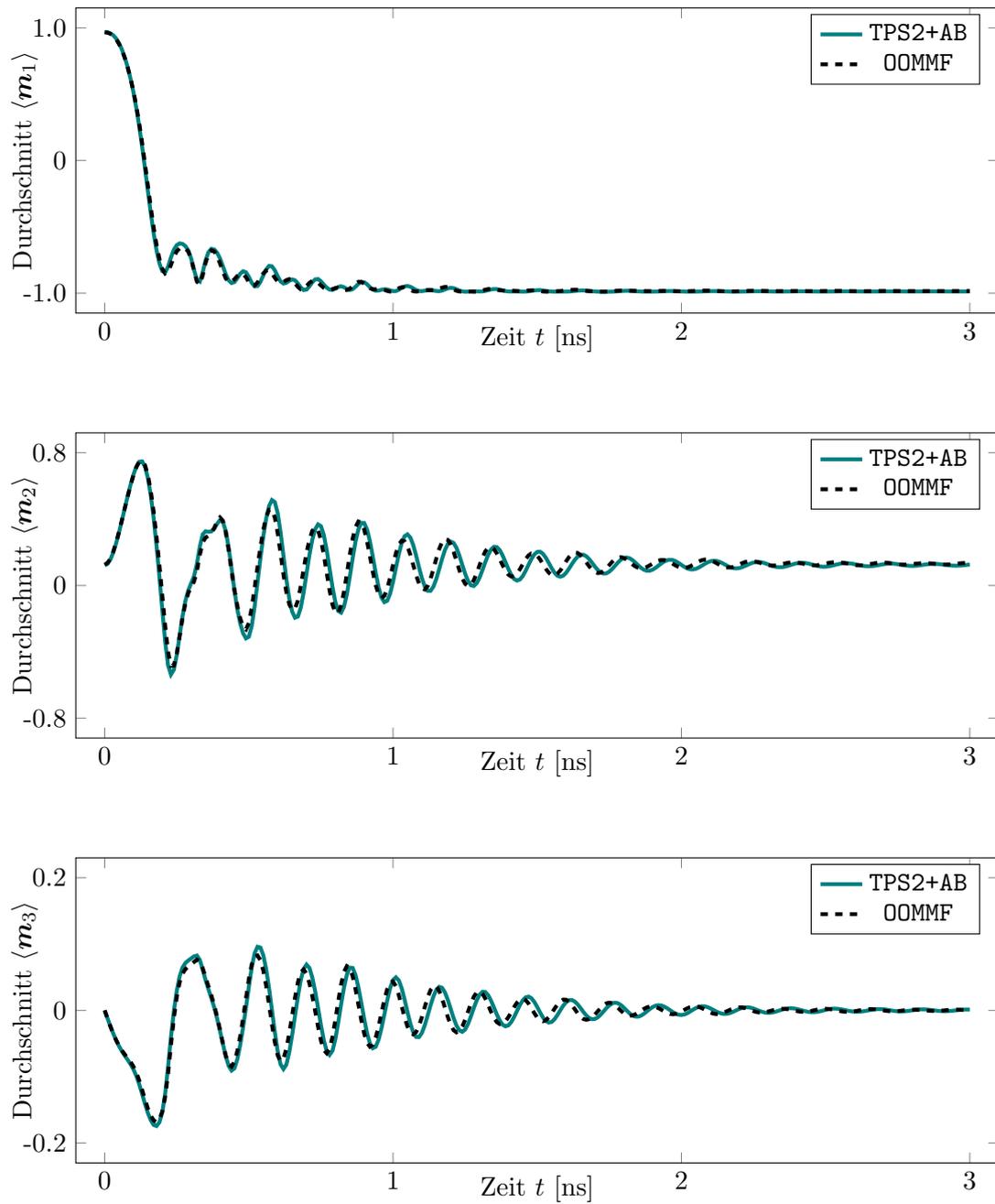


Abbildung 6.7.: μMAG #4: Zeitliche Entwicklung der Durchschnittswerte für x -, y - und z -Komponente der Magnetisierung. Die Simulation mit unserem effizienten Tangent-Plane-Integrator TPS2+AB zeigt qualitativ dieselbe Dynamik wie die Simulation des Finite-Differenzen-Codes OOMMF.

A. Appendix

In diesem Kapitel zitieren wir einerseits allgemein bekannte Resultate aus der Standardliteratur, andererseits sammeln wir einige Hilfsresultate, welche durch elementare Umformungen bewiesen werden.

A.1. Funktionalanalytische Hilfsmittel

Das Lemma von Lax–Milgram formuliert hinreichende Bedingungen an eine Bilinearform $a(\cdot, \cdot)$ auf dem Hilbert-Raum H , sodass stets eine eindeutige Lösung der Operatorgleichung $a(u, \cdot) = F \in H^*$ existiert. Ein Beweis kann in [Alt06, Abschnitt 4.2] gefunden werden.

Lemma A.1 (Lax–Milgram). *Sei H ein Hilbert-Raum (über \mathbb{R}) und $a(\cdot, \cdot)$ eine stetige, koerzive Bilinearform auf H , d.h. es existieren Konstanten $L, M > 0$, welche nur von $a(\cdot, \cdot)$ abhängen, sodass*

$$a(u, v) \leq L\|u\|_H\|v\|_H \quad \text{und} \quad a(u, u) \geq M\|u\|_H^2 \quad \text{für alle } u, v \in H.$$

Dann existiert für jedes $F \in H^*$ ein eindeutiges $u \in H$, sodass $a(u, \cdot) = F \in H^*$. □

Wir benötigen die Hölder'sche Ungleichung, welche zum Beispiel in [Alt06, Abschnitt 1.16] bewiesen wird.

Lemma A.2 (Hölder'sche Ungleichung). *Sei $1 \leq p \leq q \leq \infty$ mit $1 = 1/p + 1/q$ und $f \in L^p(\Omega)$, sowie $g \in L^q(\Omega)$. Dann gilt $fg \in L^1(\Omega)$ mit*

$$\|fg\|_{L^1(\Omega)} \leq \|f\|_{L^p(\Omega)}\|g\|_{L^q(\Omega)}. \tag{A.1}$$

□

Die folgende Interpolationsungleichung folgt aus der Hölder'schen Ungleichung.

Lemma A.3 (Interpolationsungleichung). *Sei $f \in L^p(\Omega) \cap L^q(\Omega)$ und $1 \leq q \leq r \leq p$. Sei $0 \leq \theta \leq 1$ so, dass $1/r = (1 - \theta)/p + \theta/q$. Dann gilt*

$$\|f\|_{L^r(\Omega)} \leq \|f\|_{L^p(\Omega)}^{1-\theta} \|f\|_{L^q(\Omega)}^\theta. \tag{A.2}$$

Beweis. Im Fall $p = q$ folgt $r = p = q$ und folglich (A.2) mit Gleichheit. Ohne Einschränkung der Allgemeinheit sei also $q < p$. Nun existiert $t \in [0, 1]$, sodass sich r als Konvexkombination $r = tp + (1 - t)q$ darstellen lässt. In den Fällen $\theta = 0$ beziehungsweise $\theta = 1$ folgt sofort $r = p$ beziehungsweise $r = q$, einer der Exponenten auf der rechten Seite von (A.2) verschwindet, und es folgt direkt wieder (A.2) mit Gleichheit.

Wir müssen also nur den Fall $q < p$, sowie $0 < t < 1$ betrachten. In diesem Fall gilt

$t = (r - q)/(p - q)$ und die Behauptung folgt aus der Hölder'schen Ungleichung (Lemma A.2) und einer kurzen Rechnung

$$\|\mathbf{f}\|_{\mathbf{L}^r(\Omega)}^r = \int_{\Omega} |\mathbf{f}|^{tp} |\mathbf{f}|^{(1-t)q} dx \stackrel{(A.1)}{\leq} \| |\mathbf{f}|^{tp} \|_{\mathbf{L}^{1/t}(\Omega)} \| |\mathbf{f}|^{(1-t)q} \|_{\mathbf{L}^{1/(1-t)}(\Omega)} = \|\mathbf{f}\|_{\mathbf{L}^p(\Omega)}^{tp} \|\mathbf{f}\|_{\mathbf{L}^q(\Omega)}^{(1-t)q}.$$

Nach Voraussetzung gilt $\theta := \frac{q}{r} \frac{p-r}{p-q}$, und damit folgen die Identitäten

$$(1 - \theta)r = \frac{r - q}{p - q} p = tp, \quad \text{sowie} \quad \theta r = \frac{p - r}{p - q} q = \left(1 - \frac{r - q}{p - q}\right) q = (1 - t)q.$$

Einsetzen in vorige Rechnung liefert

$$\|\mathbf{f}\|_{\mathbf{L}^r(\Omega)}^r \leq \|\mathbf{f}\|_{\mathbf{L}^p(\Omega)}^{(1-\theta)r} \|\mathbf{f}\|_{\mathbf{L}^q(\Omega)}^{\theta r}.$$

Potenzieren mit $1/r$ zeigt nun die Behauptung. □

Der folgende Einbettungssatz von Sobolev wird zum Beispiel in [Alt06, Abschnitt 8.9] bewiesen.

Satz A.4 (Sobolev'scher Einbettungssatz). *Sei $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ ein beschränktes Gebiet mit $\partial\Omega \in C^{0,1}$ und $1 \leq p, q < \infty$, $k, m \in \mathbb{N}_0$ mit $m > k$. Dann ist die Einbettung $\mathbf{W}^{m,p}(\Omega) \hookrightarrow \mathbf{W}^{k,q}(\Omega)$ stetig, falls $m - n/p \geq k - n/q$. Insbesondere ist für $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ die Einbettung $\mathbf{H}^1(\Omega) \hookrightarrow \mathbf{L}^6(\Omega)$ stetig.* □

Der folgende Einbettungssatz von Rellich wird zum Beispiel in [Alt06, Abschnitt 6.4] bewiesen.

Satz A.5 (Rellich). *Sei $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ ein beschränktes Gebiet mit $\partial\Omega \in C^{0,1}$ und $m \in \mathbb{N}_0$. Dann ist die Einbettung $\mathbf{H}^{m+1}(\Omega) \hookrightarrow \mathbf{H}^m(\Omega)$ kompakt.* □

Der folgende Satz von Eberlein–Šmulian wird in [Yos80, Abschnitt V.5] bewiesen.

Satz A.6 (Eberlein–Šmulian). *Jede beschränkte Folge in einem reflexiven Banach-Raum besitzt eine schwach konvergente Teilfolge.* □

Der folgende Satz von Banach–Alaoglu wird in [GD03, Appendix C] bewiesen.

Satz A.7. *Sei B ein Banach-Raum. Dann ist die abgeschlossene Einheitskugel in B^* abgeschlossen in der schwach-* Topologie.*

Der Spursatz wird zum Beispiel in [Alt06, Abschnitt 6.6] bewiesen.

Satz A.8 (Spursatz). *Sei $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ ein beschränktes Gebiet mit $\partial\Omega \in C^{0,1}$. Dann existiert genau eine stetige lineare Abbildung $\gamma: \mathbf{H}^1(\Omega) \rightarrow \mathbf{L}^2(\partial\Omega)$ mit*

$$\gamma u = u|_{\partial\Omega} \quad \text{für alle } u \in C^0(\bar{\Omega}) \cap \mathbf{H}^1(\Omega).$$

Dieser Operator γ wird als Spuroperator bezeichnet.

Die folgenden zwei Eigenschaften schwach konvergenter Folgen in Hilbert-Räumen werden zum Beispiel in [Alt06, Abschnitt 6.2] bewiesen.

Lemma A.9. *Sei H ein Hilbert-Raum mit Skalarprodukt $\langle \cdot, \cdot \rangle_H$. Seien $(f_n)_{n \in \mathbb{N}}, (g_n)_{n \in \mathbb{N}} \subset H$ Folgen mit $f_n \rightarrow f \in H$, sowie $g_n \rightarrow g \in H$ für $n \rightarrow \infty$. Dann konvergiert auch das Skalarprodukt der Folgenglieder*

$$\langle f_n, g_n \rangle_H \rightarrow \langle f, g \rangle_H \quad \text{für } n \rightarrow \infty \quad (\text{A.3})$$

gegen das Skalarprodukt der Grenzfunktionen. □

Lemma A.10. *Sei H ein Hilbert-Raum und $(f_n)_{n \in \mathbb{N}} \subset H$ eine Folge in H mit $f_n \rightarrow f \in H$ für $n \rightarrow \infty$. Dann gilt*

$$\|f\|_H \leq \liminf_{n \rightarrow \infty} \|f_n\|_H. \quad (\text{A.4})$$

Wir sagen auch, die $\|\cdot\|_H$ -Norm ist schwach (folgen-)unterhalbstetig. □

A.2. Sonstiges

Wir sammeln einige elementare Nebenrechnungen in diesem Kapitel, um uns in den Beweisen in Kapitel 5.2 und in den Herleitungen in Kapitel 4 auf die entscheidenden Ideen fokussieren zu können.

Das folgende Lemma wird durch direktes Nachrechnen verifiziert.

Lemma A.11. *Seien $\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{w} \in \mathbb{R}^3$, dann gilt*

$$(\mathbf{u} \times \mathbf{w}) \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (\text{A.5})$$

$$\mathbf{u} \cdot (\mathbf{v} \times \mathbf{w}) = (\mathbf{u} \times \mathbf{v}) \cdot \mathbf{w}, \quad (\text{A.6})$$

$$\mathbf{u} \times (\mathbf{v} \times \mathbf{w}) = (\mathbf{u} \cdot \mathbf{w})\mathbf{v} - (\mathbf{u} \cdot \mathbf{v})\mathbf{w}. \quad (\text{A.7})$$

Die letzte Formel wird auch *Graßman-Identität* genannt. □

Für vektorwertige Funktionen $\mathbf{f}, \mathbf{g}: \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$ verwenden wir die Notation

$$\nabla \mathbf{f} \times \mathbf{g} := (\partial_1 \mathbf{f} \times \mathbf{g}, \partial_2 \mathbf{f} \times \mathbf{g}, \partial_3 \mathbf{f} \times \mathbf{g}), \quad (\text{A.8})$$

sowie $\mathbf{f} \times \nabla \mathbf{g} := -\nabla \mathbf{g} \times \mathbf{f}$. Aus der Produktregel und (A.5) erhält man die folgenden Identitäten.

Lemma A.12. *Seien $\mathbf{f}, \mathbf{g}: \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$, dann gilt*

$$\nabla(\mathbf{f} \times \mathbf{g}) = \nabla \mathbf{f} \times \mathbf{g} + \mathbf{f} \times \nabla \mathbf{g}, \quad (\text{A.9})$$

$$(\nabla \mathbf{f} \times \mathbf{g}) : \nabla \mathbf{f} = 0. \quad (\text{A.10})$$

Kombinieren der beiden Identitäten liefert

$$\nabla(\mathbf{f} \times \mathbf{g}) : \nabla \mathbf{f} = (\mathbf{f} \times \nabla \mathbf{g}) : \nabla \mathbf{f}. \quad (\text{A.11})$$

□

Eine oft verwendete Ungleichung ist die Young'sche Ungleichung.

Lemma A.13 (Young'sche Ungleichung). *Seien $a, b \in \mathbb{R}$ und $\delta > 0$ beliebig, dann gilt*

$$ab \leq \frac{\delta}{2}a^2 + \frac{1}{2\delta}b^2. \quad (\text{A.12})$$

Beweis. Wir rechnen nach

$$\frac{\delta}{2}a^2 - ab + \frac{1}{2\delta}b^2 = \left(\sqrt{\frac{\delta}{2}}a - \sqrt{\frac{1}{2\delta}}b \right)^2 \geq 0.$$

Addieren von ab auf beiden Seiten der Ungleichung schließt den Beweis. □

Literaturverzeichnis

- [AGL05] J. Ahrens, B. Geveci, and C. Law. *ParaView: An End-User Tool for Large Data Visualization*. Visualization Handbook, Elsevier, 2005.
- [AHP⁺14] C. Abert, G. Hrkac, M. Page, D. Praetorius, M. Ruggeri, and D. Suess. Spin-polarized transport in ferromagnetic multilayers: An unconditionally convergent FEM integrator. *Comput. Math. Appl.*, 68(6):639–654, 2014.
- [AJ06] F. Alouges and P. Jaisson. Convergence of a finite element discretization for the Landau–Lifshitz equation in micromagnetism. *Math. Models Methods Appl. Sci.*, 16(2):299–316, 2006.
- [AKST14] F. Alouges, E. Kritsikis, J. Steiner, and J.-C. Toussaint. A convergent and precise finite element scheme for Landau–Lifschitz–Gilbert equation. *Numer. Math.*, 128(3):407–430, 2014.
- [AKT12] F. Alouges, E. Kritsikis, and J.-C. Toussaint. A convergent finite element approximation for Landau–Lifschitz–Gilbert equation. *Physica B*, 407(9):1345–1349, 2012.
- [Alo08] F. Alouges. A new finite element scheme for Landau–Lifchitz equations. *Discrete Contin. Dyn. Syst. Ser. S*, 1(2):187–196, 2008.
- [Alt06] H. W. Alt. *Lineare Funktionalanalysis*. Springer, Berlin, Heidelberg, fifth edition, 2006.
- [AS92] F. Alouges and A. Soyeur. On global weak solutions for Landau–Lifshitz equations: Existence and nonuniqueness. *Nonlinear Anal.*, 18(11):1071–1084, 1992.
- [Bar05] S. Bartels. Stability and convergence of finite-element approximation schemes for harmonic maps. *SIAM J. Numer. Anal.*, 43(1):220–238, 2005.
- [BFF⁺14] F. Bruckner, M. Feischl, T. Führer, P. Goldenits, M. Page, D. Praetorius, M. Ruggeri, and D. Suess. Multiscale modeling in micromagnetics: Existence of solutions and numerical integration. *Math. Models Methods Appl. Sci.*, 24(13):2627–2662, 2014.
- [BKP08] S. Bartels, J. Ko, and A. Prohl. Numerical analysis of an explicit approximation scheme for the Landau–Lifshitz–Gilbert equation. *Math. Comp.*, 77(262):773–788, 2008.

- [BS08] S. C. Brenner and L. R. Scott. *The mathematical theory of finite element methods*, volume 15 of *Texts in Applied Mathematics*. Springer, third edition, 2008.
- [com] The Scipy community. `scipy.sparse.linalg.gmres`. <https://docs.scipy.org/doc/scipy-0.14.0/reference/generated/scipy.sparse.linalg.gmres.html>. Aufgerufen am 11. Dezember 2017.
- [DP99] M. J. Donahue and D. G. Porter. OOMMF user’s guide, Version 1.0. Intera-gency Report NISTIR 6376, National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD, 1999.
- [DPP⁺17] G. Di Fratta, C.-M. Pfeiler, D. Praetorius, M. Ruggeri, and B. Stiftner. Linear second order IMEX-type integrator for the (eddy current) Landau–Lifshitz–Gilbert equation. Extended preprint available at arXiv:1711.10715, 2017.
- [FK90] D. R. Fredkin and T. R. Koehler. Hybrid method for computing demagnetization fields. *IEEE Trans. Magn.*, 26(2):415–417, 1990.
- [GD03] A. Granas and J. Dugundji. *Fixed point theory*. Springer monographs in mathematics. Springer-Verlag, New York, 2003.
- [Gol12] P. Goldenits. *Konvergente numerische Integration der Landau–Lifshitz–Gilbert Gleichung*. PhD thesis, TU Wien, 2012. In German.
- [KTF⁺08] E. Kritsikis, J.-C. Toussaint, O. Fruchart, H. Szabolics, and L. Buda-Prejbeanu. Fast computation of magnetostatic fields by nonuniform fast Fourier transforms. *Appl. Phys. Lett.*, 93(13):132508, 2008.
- [KVB⁺14] E. Kritsikis, A. Vaysset, L. D. Buda-Prejbeanu, F. Alouges, and J.-C. Toussaint. Beyond first-order finite element schemes in micromagnetics. *J. Comput. Phys.*, 256:357–366, 2014.
- [mmag] NIST micromagnetic modeling activity group. μ MAG micromagnetics website. <http://www.ctcms.nist.gov/~rdm/mumag.org.html>. Aufgerufen am 6. Dezember 2017.
- [Pra04] D. Praetorius. Analysis of the operator $\Delta^{-1}\text{div}$ arising in magnetic models. *Z. Anal. Anwend.*, 23(3):589–605, 2004.
- [PRS17] D. Praetorius, M. Ruggeri, and B. Stiftner. Convergence of an implicit-explicit midpoint scheme for computational micromagnetics. 2017. Accepted for publication in *Comput. Math. Appl.*, preprint available at arXiv:1611.02465v2.
- [Rie17] A. Rieder. *Convolution Quadrature and Boundary Element Methods in wave propagation: a time domain point of view*. PhD thesis, TU Wien, 2017.
- [Rug16] M. Ruggeri. *Coupling and numerical integration of the Landau–Lifshitz–Gilbert equation*. PhD thesis, TU Wien, 2016.

- [SBA⁺15] W. Śmigaj, T. Betcke, S. Arridge, J. Phillips, and M. Schweiger. Solving boundary integral problems with BEM++. *ACM Trans. Math. Softw.*, 41(2):6:1–6:40, 2015.
- [Sch] J. Schöberl. Netgen/NGSolve Finite Element Library. <https://ngsolve.org/>. Aufgerufen am 11. Dezember 2017.
- [SS11] C. Schwab and S. A. Sauter. *Boundary Element Methods*, volume 39 of *Springer Series in Computational Mathematics*. Springer, 2011.
- [Tho06] V. Thomée. *Galerkin finite element methods for parabolic problems*, volume 25 of *Springer Series in Computational Mathematics*. Springer-Verlag, Berlin, second edition, 2006.
- [Yos80] K. Yoshida. *Functional analysis*. Classics in mathematics. Springer, Berlin, sixth edition, 1980.