



TECHNISCHE
UNIVERSITÄT
WIEN

B A C H E L O R A R B E I T

Numerisches Lösen der Landau-Lifshitz-Gilbert Gleichung für dünne Schichten

ausgeführt am

28. März 2022

Institut für
Analysis und Scientific Computing
TU Wien

unter der Anleitung von

Prof. Dr. Dirk Praetorius

und

Dr. Michele Ruggeri

durch

Samuel Keller

Matrikelnummer: 11771083

Schlagergasse 7/14

1090 Wien

Wien, am 28. März 2022

Danksagung

Diese Arbeit wäre nicht möglich gewesen ohne der Unterstützung von vielen Personen. Danken möchte ich meinem Betreuer Professor Dirk Praetorius für die Anleitung während des Schreibens dieser Arbeit. Dank gebührt auch meiner Familie und meiner Freundin für den Rat, die Unterstützung und die Ermutigung, die sie mir haben zukommen lassen. Besonderer Dank gebührt Dr. Michele Ruggeri, welcher mir jederzeit mit seinem Wissen und seiner Zeit zur Seite gestanden ist und das über Monate hinweg.

Eidesstattliche Erklärung

Ich erkläre an Eides statt, dass ich die vorliegende Bachelorarbeit 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 28. März 2022



Samuel Keller

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
1.1	Ziel der Arbeit	1
1.2	Notation	2
2	Problem	4
2.1	Energie und Landau–Lifshitz–Gilbert-Gleichung (3D)	4
2.1.1	Heisenberg-Austausch	4
2.1.2	Anisotropie-Energie	4
2.1.3	Antisymmetrische Austauschenergie	5
2.1.4	Externes Feld	5
2.1.5	Streufeld	6
2.1.6	Gesamtenergie	6
2.1.7	Landau–Lifshitz–Gilbert-Gleichung	6
2.2	Entdimensionalisierung	7
2.3	Energie und Landau–Lifshitz–Gilbert-Gleichung für dünne Schichten (2D)	9
3	Numerisches Verfahren	14
3.1	Notation/Grundlagen der FEM	14
3.2	Tangent-Plane-Verfahren	15
4	Matrix Form	17
4.1	Gleichungssystem	17
4.2	Systemmatrix A	18
4.2.1	Massenmatrix M	19
4.2.2	Schiefsymmetrische Matrix S	19
4.2.3	Steifigkeitsmatrix K	20
4.3	Resultatvektor b	20
4.3.1	Steifigkeitsmatrix	20
4.3.2	Externes Feld	21
4.3.3	DMI-Bulk Matrix	21
4.3.4	Anisotropie-Energie	22
4.3.5	Streufeld + DMI-Bulk Energie	22
5	Implementierung	23
5.1	Massenmatrix M und Steifigkeitsmatrix K	23
5.2	Schiefsymmetrische Matrix S	24
5.3	Lagrange Multiplikator	26
5.4	Externes Feld	26
5.5	DMI Bulk Energie	27

5.6	Anisotropie-Energie	27
5.7	Streufeld + DMI-Bulk Energie	27
6	Numerische Experimente	28
6.1	Experiment 1	28
6.1.1	Aufbau	28
6.1.2	Resultate	29
6.2	Experiment 2	35
6.2.1	Aufbau	35
6.2.2	Resultate	36
	Literaturverzeichnis	38

1 Einleitung

1.1 Ziel der Arbeit

Diese Arbeit widmet sich dem numerischen Lösen der Landau–Lifshitz–Gilbert-Gleichung (LLG-Gleichung) für dünne Schichten. Der Mikromagnetismus ist eine Theorie über das magnetische Verhalten von kleinen Körpern ($\leq 1\mu m$). Dabei wird der physikalische Körper als Kontinuum aufgefasst und aus dem Zusammenspiel von physikalischen Effekten wird die Magnetisierung des Körpers ermittelt. Diese physikalischen Effekte lassen sich in dem effektiven magnetischen Feld zusammenfassen, welches aus dem Heisenberg-Austausch, der Anisotropie, dem antisymmetrischen Austausch, dem externen Feld und dem Streufeld besteht. Die Theorie des Mikromagnetismus ist beim Untersuchen von mikromagnetischen Strukturen unerlässlich, welche eine bedeutsame Rolle für magnetische Datenspeicherung haben können. Dazu sind numerische Verfahren vonnöten um mithilfe von Simulationen das Verhalten dieser Strukturen untersuchen. Das dynamische Modell zum Untersuchen dieser Strukturen ist die LLG-Gleichung, welches das Verhalten von magnetischen Momenten in der Zeit in Abhängigkeit des effektiven Feldes beschreibt. Der antisymmetrische Austausch, auch Dzyaloshinskii–Moriya Interaktion (DMI) genannt, übt ein Drehmoment auf die Magnetisierung aus, welches benachbarte Spins senkrecht zueinander ausrichten möchte. Dies wirkt dem Heisenberg-Austausch entgegen und ist damit hauptverantwortlich für die Bildung von Skyrmionen. Diese magnetischen Skyrmionen sind wirbel-ähnliche Strukturen, welche theoretisch vorhergesagt und experimentell bestätigt wurden. Skyrmionen haben das Potential, Lösungen für Speichermedien mit niedrigem Energieverbrauch und hoher Datendichte zu bieten.

Aus diesem Grund ist mit dem numerische Lösen der LLG-Gleichung ein wichtiger Schritt für die Untersuchung von Skyrmionen und deren Verhalten getan. Da die Berechnung der LLG-Gleichung im Drei-Dimensionalen durch die benötigte große Zahl an Gitterpunkten für die Finite Elemente Methode und die teure Berechnung des Streufeldes langsam ist, bietet sich für die Untersuchung der meist flachen, dünnen Scheiben ein zwei-dimensionales Modell an. In [2] wird die Konvergenz der Lösungen für dünne Schichten zu einem zwei-dimensionalen Modell bewiesen. Durch die Reduktion der Dimension verringert sich die Anzahl der für die Berechnung benötigten Gitterpunkte um ein Vielfaches und die teure Berechnung des Streufeldes kann durch eine vergleichsweise billige Berechnung einer erweiterten Anisotropie ersetzt werden. Das führt zu einer effizienteren Berechnung der Lösung mit auf das drei-dimensionale System zurückführbaren Ergebnissen.

In Kapitel 2 widmen wir uns der genauen Beschreibung des Problems. Es werden die im Mikromagnetismus wirkenden Energieformen erläutert und die Landau–Lifshitz–Gilbert-Gleichung erklärt. Des weiteren wird das physikalische Problem entdimensionalisiert, um es auf die numerische Berechnung vorzubereiten und anschließend auf den zwei-dimensionalen Fall bezogen. In Kapitel 3 wird eine kurze Einführung in die Finite Elemente Methode

gegeben sowie das Tangent-Plane-Verfahren vorgestellt, welches verwendet wird, um das Problem numerisch zu berechnen. Kapitel 4 setzt sich detailliert mit der Diskretisierung der LLG-Gleichung auseinander und leitet ein Gleichungssystem her, welches der Berechnung des Tangent-Plane-Verfahrens entspricht. In Kapitel 5 werden für die Implementierung des Verfahrens in MATLAB wichtige Details ausgearbeitet. Im abschließenden Kapitel 6 werden zwei numerische Experimente durchgeführt. In Experiment 1 wird, ausgehend von unterschiedlichen Anfangsmagnetisierungen, das Verhalten von Equilibrium-Zuständen in Abhängigkeit von Scheiben-Durchmesser und angelegtem externen Feld untersucht. In Experiment 2 wird die Stabilität von Skyrmionen gegen Einwirkungen von externen Feldern in der Ebene simuliert.

1.2 Notation

Wir wollen im Folgenden die Notation einführen, welche im weiteren Verlauf der Arbeit verwendet wird. Für eine Funktion $u : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^3$ mit $d \in \{2, 3\}$, definieren wir die Wirkungsweise folgender Operatoren:

$$\nabla_d u = (\partial_1 u, \dots, \partial_d u),$$

$$|\nabla_d u|^2 = \sum_{i=1}^d \sum_{j=1}^3 |\partial_i u_j|^2,$$

$$\nabla_d \times u = \sum_{i=1}^d e_i \times \partial_i u,$$

$$\nabla_d u \times u = (\partial_1 u \times u, \dots, \partial_d u \times u).$$

Für eine vektorwertige Funktion $v : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$ und eine Funktion $w : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ definieren wir:

$$\nabla_d \cdot v = \sum_{i=1}^d \partial_i v_i,$$

$$\Delta_d w = \sum_{i=1}^d \partial_{ii} w,$$

$$\Delta_d u = \begin{pmatrix} \Delta_d u_1 \\ \Delta_d u_2 \\ \Delta_d u_3 \end{pmatrix}.$$

Für den Normalvektor $\eta : \partial\Omega \rightarrow \mathbb{S}^2$ definieren wir

$$\partial_\eta m = (\nabla_3 m)\eta = (\partial_\eta m_1, \dots, \partial_\eta m_3)^T$$

Das Levi-Civita-Symbol $\varepsilon_{ijk\dots}$ mit $ijk\dots \in \mathbb{N}$ ist definiert als

$$\varepsilon_{ijk\dots} = \begin{cases} +1, & \text{wenn } (i, j, k, \dots) \text{ eine gerade Permutation von } (1, 2, 3, \dots) \text{ ist} \\ -1, & \text{wenn } (i, j, k, \dots) \text{ eine ungerade Permutation von } (1, 2, 3, \dots) \text{ ist} \\ 0, & \text{wenn mindestens zwei Indizes gleich sind.} \end{cases}$$

Das Kronecker-Produkt \otimes ist für eine $(m \times n)$ -Matrix A und eine $(p \times q)$ -Matrix B wie folgt definiert

$$A \otimes B = \begin{pmatrix} a_{11}B & \cdots & a_{1n}B \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1}B & \cdots & a_{mn}B \end{pmatrix}. \quad (1.1)$$

2 Problem

In der folgenden Arbeit betrachten wir ein Gebiet $\Omega \subset \mathbb{R}^3$, welches ein ferromagnetisches Material modelliert. Auf diesem Gebiet wirkt eine Magnetisierung $M : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^3$, ein Vektorfeld, welches mit einer materialabhängigen Konstanten $M_s > 0$ folgende Eigenschaft erfüllt: $|M(x)| = M_s$ in Ω . Die sogenannte Sättigungsmagnetisierung M_s ist temperaturabhängig, kann aber für konstante Temperaturen unter einem materialabhängigen Wert als konstant in dem Medium angenommen werden. Diese Annahme werden wir auch treffen, so dass wir mit m die normalisierte Magnetisierung bezeichnen werden:

$$m = \frac{M}{M_s}$$

Die Funktion $m : (0, T) \times \Omega \rightarrow \mathbb{S}^2$ beschreibt also die magnetischen Momente zu jedem Zeitpunkt im Zeitintervall $(0, T)$ und es gilt $|m(t, x)| = 1$ für alle $(t, x) \in (0, T) \times \Omega$.

2.1 Energie und Landau–Lifshitz–Gilbert-Gleichung (3D)

Um zu verstehen, was in der LLG-Gleichung vorstatten geht, müssen wir uns zuerst überlegen, was die physikalischen Hintergründe sind. Im Folgenden geben wir eine kurze Einführung in die mikromagnetische Energie und ihre Komponenten.

Das Verhalten magnetischer Momente in einem ferromagnetischen Körper wird über die mikromagnetische Energie beschrieben.

2.1.1 Heisenberg-Austausch

Die Austauschenergie stammt von den Interaktionen zwischen den Spins. Innerhalb eines homogenen Mediums wird sie als Energie modelliert, die eine nicht-homogene Magnetisierung bestraft. Definiert ist sie mit

$$\mathcal{E}_{ex}(m) = A \int_{\Omega} |\nabla_3 m|^2,$$

wobei $A > 0$ die materialabhängige Austauschkonstante ist. Ihre Größenordnung beträgt circa 10^{-11} J/m.

2.1.2 Anisotropie-Energie

Die Anisotropie-Energie kommt aus der kristallinen Struktur des Materials. Diese gibt bestimmte bevorzugte Magnetisierungsachsen vor, wobei die Anisotropie-Energie als die Arbeit aufgefasst werden kann, die vonnöten ist, um die Magnetisierung aus diesen Achsen zu

bewegen. Sie ist für eine gegebene, stetige Funktion $\phi : \mathbb{S}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ wie folgt definiert:

$$\mathcal{E}_{ani}(m) = K \int_{\Omega} \phi(m),$$

wobei K , gemessen in J/m^3 , eine generelle Anisotropiekonstante ist. Beispiele für solche Funktionen sind für $a \in \mathbb{S}^2$ die uniachziale Anisotropie-Dichte

$$\phi(m) = 1 - (a \cdot m)^2 \quad (2.1)$$

sowie die planare Anisotropie-Dichte

$$\phi(m) = (a \cdot m)^2. \quad (2.2)$$

2.1.3 Antisymmetrische Austauschenergie

Die antisymmetrische Austauschenergie, auch Dzyaloshinskii–Moriya-Interaktion (DMI) genannt, kommt aus der atomaren Struktur des Materials und dem Fehlen von Invertionssymmetrie. Sie wirkt dem Heisenberg-Austausch entgegen und ist maßgeblich für die Bildung von magnetischen Skyrmionen mitverantwortlich. In einem homogenen Medium kann der antisymmetrische Austausch wie folgt modelliert werden:

$$\mathcal{E}_{DM}(m) = \int_{\Omega} D : (\nabla_3 m \times m) = \sum_{j=1}^3 \int_{\Omega} d_j \cdot (\partial_j m \times m),$$

wobei d_j die j -te Spalte des Spiralisationstensors $D \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$ ist, welcher von der kristallinen Klasse des Materials abhängt. Ein Beispiel für solch einen Spiralisationstensor wäre

$$D = \delta \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

mit der DMI Konstanten δ in J/m^2 . In diesem Fall vereinfacht sich $\mathcal{E}_{DM}(m)$ zu

$$\mathcal{E}_{DM}(m) = \delta \int_{\Omega} (\nabla_3 \times m) \cdot m.$$

2.1.4 Externes Feld

Das externe Feld beschreibt den Einfluss von externen magnetischen Feldern auf die Magnetisierung des Körpers. Die zugehörige Energie, auch Zeemann-Energie genannt, hat die Form

$$\mathcal{E}_{ext}(m) = -\mu_0 M_s \int_{\Omega} H_{ext} \cdot m,$$

wobei $H_{ext} : (0, T) \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}^3$ in A/m das angelegte externe Feld ist und vereinfacht angenommen wird, dass sich dieses durch die Magnetisierung nicht ändert. Des Weiteren ist μ_0 die magnetische Feldkonstante, welche experimentell bestimmt wird, und etwa in der Größenordnung $1,257 \cdot 10^{-6} \text{N}/\text{A}^2$ liegt.

2.1.5 Streufeld

Das Streufeld wirkt auf die Magnetisierung, indem es versucht, das gesamte magnetische Moment zu reduzieren. Die zugehörige Energie ist

$$\mathcal{E}_s(m) = -\frac{\mu_0 M_s}{2} \int_{\Omega} H_s(m) \cdot m,$$

mit dem magnetischen Feld H_s , welches die stationäre Maxwell-Gleichung

$$\begin{aligned} \nabla_3 \cdot (H_s + M_s m) &= 0, & \text{im } \mathbb{R}^3 \\ \nabla_3 \times H_s &= 0, & \text{im } \mathbb{R}^3 \end{aligned}$$

löst.

2.1.6 Gesamtenergie

Die Gesamtenergie $\mathcal{E}(m)$ wird aus der Addition der obigen fünf Energieanteile erhalten,

$$\mathcal{E}(m) = \mathcal{E}_{ex}(m) + \mathcal{E}_{ani}(m) + \mathcal{E}_{DM}(m) + \mathcal{E}_{ext}(m) + \mathcal{E}_s(m).$$

2.1.7 Landau–Lifshitz–Gilbert-Gleichung

Die Landau–Lifshitz–Gilbert-Gleichung (LLG-Gleichung) beschreibt das dynamische Verhalten magnetischer Momente in einem ferromagnetischen Festkörper unter Einfluss des effektiven Feldes H_{eff} . Das effektive Feld beschreibt den Gradienten des Energieabfalls, der auftritt, da in der Natur energiearme Zustände bevorzugt werden. Formuliert liest sie sich

$$\partial_t m = -\frac{\gamma_0}{1 + \alpha^2} m \times H_{\text{eff}}(m) - \frac{\gamma_0 \alpha}{1 + \alpha^2} m \times \left[m \times H_{\text{eff}}(m) \right] \quad (2.3)$$

mit

$$\gamma_0 = -\gamma \mu_0 \quad \text{wobei } \gamma < 0 \text{ der gyromagnetische Faktor des Elektrons ist}$$

und

$$H_{\text{eff}}(m) = -\frac{1}{\mu_0 M_s} \frac{\partial \mathcal{E}(m)}{\partial m}.$$

Hier bezeichnet $\partial \mathcal{E}(m)/\partial m$ die Gâteaux-Ableitung. Der einheitslose Gilbert-Dämpfungsparameter $\alpha > 0$ ist materialabhängig und hat die Größenordnung 10^{-1} bis 10^{-2} .

Die einzelnen Energie-Beiträge eingesetzt, ergibt sich für das effektive Feld

$$H_{\text{eff}}(m) = \frac{2A}{\mu_0 M_s} \Delta m - \frac{K}{\mu_0 M_s} \nabla_3 \phi(m) - \frac{2\delta}{\mu_0 M_s} \nabla_3 \times m + H_{\text{ext}} + H_s(m) \quad (2.4)$$

unter der Randbedingung

$$2A\partial_n m + \delta m \times n = 0 \quad \text{auf } \partial\Omega \times (0, T) \quad (2.5)$$

und der Anfangswertbedingung

$$m(0) = m^0 \in H^1(\Omega; \mathbb{S}^2) \quad \text{in } \Omega. \quad (2.6)$$

Die partielle Differentialgleichung (2.3)–(2.6) ist nicht-linear (H_{eff} beinhaltet Ableitungen von m nach dem Ort), nicht konvex (die Nebenbedingung $|m| = 1$ ist nicht konvex) sowie nicht-lokal (das Streufeld H_s hängt nicht-lokal von m ab).

2.2 Entdimensionalisierung

Für die Berechnung der Gleichung mittels Finite Elemente Methode (FEM) wollen wir die Gleichung entdimensionalisieren, also die physikalischen Einheiten loswerden. Dazu müssen wir das effektive Feld, die Zeit und den Ort skalieren. Das ist notwendig, um auf dem Level der Diskretisierung ein gut konditioniertes Problem zu erhalten. Das effektive Feld H_{eff} sowie die Energie \mathcal{E} skalieren wir mit

$$h_{\text{eff}}(m) = \frac{H_{\text{eff}}(m)}{M_s} \quad \text{und} \quad \mathcal{E}^*(m) = \frac{\mathcal{E}(m)}{\mu_0 M_s^2}.$$

Die Zeit t skalieren wir mit $t^* = \gamma_0 M_s t$ und den Ort x mit $x^* = x/\ell_{ex}$ mit der Austauschlänge $\ell_{ex} = \sqrt{2A/\mu_0 M_s^2}$. Damit bekommen die einzelnen Komponenten der Energie die Form

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{ex}^*(m) &= \frac{1}{2} \int_{\Omega} |\nabla_3 m|^2, \\ \mathcal{E}_{ani}^*(m) &= \frac{\kappa^2}{2} \int_{\Omega} \phi(m), \\ \mathcal{E}_{DM}^*(m) &= \frac{\delta^*}{\ell_{ex}} \int_{\Omega} (\nabla_3 \times m) \cdot m, \\ \mathcal{E}_{ext}^*(m) &= - \int_{\Omega} f \cdot m, \\ \mathcal{E}_s^*(m) &= - \frac{1}{2} \int_{\Omega} h_s(m) \cdot m, \end{aligned}$$

mit dem magnetischen Härteparameter $\kappa = \sqrt{\frac{2K}{\mu_0 M_s^2}}$ und dem skalierten Koeffizienten $\delta^* = \frac{\delta}{\mu_0 M_s^2}$. Weiters ist $f = \frac{H_{ext}}{M_s}$ das reskalierte externe Feld und $h_s(m) = \frac{H_s(m)}{M_s}$. Das reskalierte externe Feld $h_s(m)$ löst dabei

$$\begin{aligned} \nabla_3 \cdot (h_s + m) &= 0 \quad \text{im } \mathbb{R}^3 \\ \nabla_3 \times h_s &= 0 \quad \text{im } \mathbb{R}^3. \end{aligned}$$

Mit diesen Substitutionen kommt man auf die entdimensionalisierte Form der LLG Gleichung

$$\partial_t m = -\frac{1}{1+\alpha^2} m \times h_{\text{eff}}(m) - \frac{\alpha}{1+\alpha^2} m \times \left[m \times h_{\text{eff}}(m) \right] \quad (2.7)$$

unter den Rand- und Anfangsbedingungen (2.5) und (2.6).

Eine hinreichend glatte Lösung $m : \Omega \times (0, \infty) \rightarrow \mathbb{S}^2$ der LLG-Gleichung erfüllt unter der Annahme, dass das externe Feld f konstant in der Zeit ist das dissipative Energiegesetz

$$\partial_t \mathcal{E}(m(t)) = -\alpha \|\partial_t m(t)\|_{L^2(\Omega)}^2 \leq 0 \quad (2.8)$$

für alle $t > 0$. Für einen Beweis dieser Aussage sei auf [3] verwiesen.

Damit können wir ein Energiegesetz formulieren, welches den Zusammenhang der Gesamtenergie in Abhängigkeit der Anfangsenergie $\mathcal{E}(m(0))$ und der Lösung $m(t)$ darstellt.

Satz 2.1. (Energiegesetz)

Sei $m : \Omega \times (0, \infty) \rightarrow \mathbb{S}^2$ eine hinreichend glatte Lösung der LLG-Gleichung (2.7) und f konstant in der Zeit, dann gilt

$$\mathcal{E}(m(t)) + \alpha \|\partial_t m(t)\|_{L^2((0,t) \times \Omega)}^2 = \mathcal{E}(m(0)) + \alpha \int_0^t \|\partial_t m(s)\|_{L^2(\Omega)}^2 ds \quad (2.9)$$

für alle $t > 0$.

Für das Verständnis der folgenden Definition, benötigen wir die folgenden Notationen,

$\langle \cdot, \cdot \rangle_\Omega$ bezeichnet das Skalarprodukt im $L^2(\Omega)$,

$\langle \cdot, \cdot \rangle : H^1(\Omega) \times H^1(\Omega)' \rightarrow K$ bezeichnet die duale Paarung von $H^1(\Omega)$ mit $H^1(\Omega)'$.

Die duale Paarung ist eine Verallgemeinerung des Skalarprodukts, sie weist einem Vektor und einem linearen Funktional eine Zahl zu.

Als nächstes wollen wir die schwache Formulierung von (2.7) definieren.

Definition 2.2. Sei $m^0 \in H^1(\Omega)$ und erfülle $|m^0| = 1$ in Ω . Sei weiters $m : \Omega \times (0, \infty) \rightarrow \mathbb{S}^2$ ein Vektorfeld. So heißt m schwache Lösung von (2.7) unter (2.5) und (2.6), wenn m für alle $T > 0$ Folgendes erfüllt:

1. $m \in H^1(\Omega \times (0, T))$ mit $|m| = 1$ fast überall in $\Omega \times (0, T)$;
2. $m(0) = m^0$ im Sinne des Spurooperators;
3. Für alle $\psi \in H^1(\Omega \times (0, T))$ gilt

$$\begin{aligned} & \int_0^T \langle \partial_t m(t), \psi(t) \rangle_\Omega dt = \\ & - \int_0^T \langle h_{\text{eff}}(m(t)), \psi(t) \times m(t) \rangle dt + \alpha \int_0^T \langle m(t) \times \partial_t m(t), \psi(t) \rangle_\Omega dt; \end{aligned}$$

4. Es gilt das Energiegesetz

$$\mathcal{E}(m(T)) + \int_0^T \|\partial_t m(s)\|_{L^2(\Omega)}^2 ds \leq \mathcal{E}(m^0).$$

Die duale Paarung des effektiven Feldes h_{eff} für allgemeine Funktionen $\varphi, \psi \in H'(\Omega)$ ist wie folgt definiert

$$\begin{aligned} -\langle h_{\text{eff}}(\varphi), \psi \rangle &= \langle \nabla_3 \varphi, \nabla_3 \psi \rangle_\Omega + \frac{\delta}{\ell_{ex}} \langle \nabla_3 \times \varphi, \psi \rangle_\Omega + \frac{\delta}{\ell_{ex}} \langle \nabla_3 \times \psi, \varphi \rangle_\Omega \\ &+ \frac{\kappa^2}{2} \langle \nabla \phi(\varphi), \psi \rangle_\Omega - \langle f, \psi \rangle_\Omega - \langle h_s(\varphi), \psi \rangle_\Omega. \end{aligned}$$

Zuletzt wollen wir uns noch Gedanken über die Existenz von schwachen Lösungen machen.

Satz 2.3. *Sei $\mathcal{E}(m) = \mathcal{E}_{ex}(m)$, also die Gesamtenergie nur die Austausch-Energie, dann gelten folgende Aussagen:*

- (i) *Für alle $m^0 \in H^1(\Omega)$ mit $|m^0| = 1$ fast überall in Ω existiert eine schwache Lösung der LLG-Gleichung im Sinne der Definition 2.2.*
- (ii) *Es existiert eine Anfangsbedingung m^0 in $H^1(\Omega)$ mit $|m^0| = 1$ fast überall in Ω , sodass unendlich viele schwache Lösungen existieren.*

Für den Beweis von Aussage (i) und (ii) sei auf [4, Satz 1.5-1.6] verwiesen.

2.3 Energie und Landau–Lifshitz–Gilbert-Gleichung für dünne Schichten (2D)

Die bisherige Formulierung der Energie und der LLG-Gleichung fand in drei Raumdimensionen statt. Nun betrachten wir das mathematische Verhalten der Differentialgleichung für dünne Schichten.

Sei also $\Omega_\epsilon = \omega \times (0, \epsilon)$ mit $0 < \epsilon \ll 1$ und $\omega \subset \mathbb{R}^2$, sowie die Magnetisierung $m_\epsilon : \Omega_\epsilon \rightarrow \mathbb{S}^2$. Das Verhalten der Energie, für $\epsilon \rightarrow 0$, also wenn das Modell von drei in zwei Raumdimensionen übergeht

$$\mathcal{E}_\epsilon^{3D}(m_\epsilon) \longrightarrow \mathcal{E}^{2D}(m) \quad \text{für } \epsilon \rightarrow 0,$$

ist dabei für die einzelnen Komponenten faktisch wie folgt

$$\begin{aligned}\mathcal{E}_{ex}(m_\epsilon) &= \frac{1}{2} \int_{\Omega_\epsilon} |\nabla_3 m_\epsilon|^2 \rightsquigarrow \frac{1}{2} \int_\omega |\nabla_2 m|^2 + \frac{\delta^2}{2\ell_{ex}^2} |\omega| - \frac{\delta^2}{2\ell_{ex}^2} \int_\omega (m \cdot e_3)^2 \\ \mathcal{E}_{ani}(m_\epsilon) &= \frac{\kappa^2}{2} \int_{\Omega_\epsilon} \phi(m_\epsilon) \rightsquigarrow \frac{\kappa^2}{2} \int_\omega \phi(m) \\ \mathcal{E}_{DM}(m_\epsilon) &= \frac{\delta}{\ell_{ex}} \int_{\Omega_\epsilon} (\nabla_3 \times m_\epsilon) \cdot m_\epsilon \rightsquigarrow \frac{\delta}{\ell_{ex}} \int_\omega (\nabla_2 \times m) \cdot m - \frac{\delta^2}{\ell_{ex}^2} |\omega| + \frac{\delta^2}{\ell_{ex}^2} \int_\omega (m \cdot e_3)^2 \\ \mathcal{E}_{ext}(m_\epsilon) &= - \int_{\Omega_\epsilon} f \cdot m_\epsilon \rightsquigarrow - \int_\omega f \cdot m \\ \mathcal{E}_s(m_\epsilon) &= -\frac{1}{2} \int_{\Omega_\epsilon} h_s(m_\epsilon) \cdot m_\epsilon \rightsquigarrow +\frac{1}{2} \int_\omega (m \cdot e_3)^2.\end{aligned}$$

Der Beweis dieser Beobachtungen wird hier nicht erbracht, dazu sei auf [2] verwiesen. Es ist allerdings anzumerken, dass das Streufeld im Zweidimensionalen durch eine künstliche Anisotropie ersetzt wird.

Zusammengefasst ist die zweidimensionale Energie also

$$\mathcal{E}^{2D}(m) = \frac{1}{2} \int_\omega |\nabla_2 m|^2 + \frac{\kappa^2}{2} \int_\omega \phi(m) + \frac{\delta}{\ell_{ex}} \int_\omega (\nabla_2 \times m) \cdot m - \int_\omega f \cdot m \quad (2.10)$$

$$+ \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\delta^2}{\ell_{ex}^2}\right) \int_\omega (m \cdot e_3)^2 - \frac{\delta^2}{2\ell_{ex}^2} |\omega|. \quad (2.11)$$

Somit liest sich die zweidimensionale LLG-Gleichung wie folgt

$$\partial_t m = -\frac{1}{1+\alpha^2} m \times h_{\text{eff}}^{2D}(m) - \frac{\alpha}{1+\alpha^2} m \times \left[m \times h_{\text{eff}}^{2D}(m) \right] \quad (2.12)$$

mit

$$h_{\text{eff}}^{2D}(m) = -\frac{\partial \mathcal{E}^{2D}(m)}{\partial m} = \Delta_2 m - \frac{\kappa^2}{2} \nabla \phi(m) - \frac{2\delta}{\ell_{ex}} \nabla_2 \times m + f - \left(1 + \frac{\delta^2}{\ell_{ex}^2}\right) (m \cdot e_3) e_3$$

unter der Randbedingung

$$\ell_{ex} \partial_n m + \delta \sum_{i=1}^2 m \times (n_i e_i) = 0 \quad \text{auf } \partial\omega \times (0, T) \text{ mit } n_i = \begin{pmatrix} n \\ 0 \end{pmatrix} \cdot e_i$$

und der Anfangswertbedingung

$$m(0) = m^0 \in H^1(\omega; \mathbb{S}^2) \quad \text{in } \omega.$$

Die oben beschriebenen Herleitungen wollen wir mit folgendem Ergebnis von [2, Satz 1.2] auf ein solides mathematisches Fundament stellen.

Satz 2.4. Sei $m^0 \in H^1(\omega; \mathbb{S}^2)$ und $m_\epsilon^0(x, s) := m^0(x)$. Sei $\Omega_\epsilon := \omega \times (0, \epsilon)$ wie oben und zusätzlich der Rand des begrenzten Gebiets ω Lipschitz-stetig. Betrachte den Diffeomorphismus $\Phi_\epsilon : \omega \times (0, 1) \rightarrow \omega \times (0, \epsilon)$, $\Phi_\epsilon(x, t) := (x, t\epsilon)$. Zu $m_\epsilon^0 \in H^1(\Omega_\epsilon; \mathbb{S}^2)$ sei m_ϵ eine Lösung der LLG-Gleichung auf Ω_ϵ und $\hat{m}_\epsilon := m_\epsilon \circ \Phi_\epsilon$. Dann existiert $m \in H^1(\omega; \mathbb{S}^2)$ und $\hat{m}(x, s) := m(x)$, sodass $\hat{m}_\epsilon \rightarrow \hat{m}$ bezüglich der schwach-* -Topologie konvergiert, und m die 2-Dimensionale LLG-Gleichung (2.12) löst. \square

Als hilfreich für die numerische Berechnung erweist sich folgende äquivalente Formulierung des Problems (2.12) unter der Bedingung $|m| = 1$ mit denselben Rand- und Nebenbedingungen.

$$\alpha \partial_t m + m \times \partial_t m = h_{\text{eff}} - (m \cdot h_{\text{eff}}) \cdot m \quad (2.13)$$

Satz 2.5. Falls $|m(x, t)| = 1$ für $(x, t) \in \omega \times (0, T)$, so sind folgende Formulierungen der LLG-Gleichung äquivalent

$$\partial_t m = -\frac{1}{1 + \alpha^2} m \times h_{\text{eff}}(m) - \frac{\alpha}{1 + \alpha^2} m \times \left[m \times h_{\text{eff}}(m) \right]. \quad (2.14)$$

und

$$\alpha \partial_t m + m \times \partial_t m = h_{\text{eff}} - (m \cdot h_{\text{eff}}) \cdot m. \quad (2.15)$$

Beweis. Zuerst zeigen wir die Implikation (2.14) \Rightarrow (2.15). Unter Anwendung der Identität $a \times (b \times c) = (a \cdot c)b - (a \cdot b)c$ für alle $a, b, c \in \mathbb{R}^3$ folgt folgende Äquivalenz

$$m \times (m \times h_{\text{eff}}) = (m \cdot h_{\text{eff}})m - |m|^2 h_{\text{eff}}.$$

Damit lässt sich die Gleichung (2.14) wie folgt umformulieren:

$$\partial_t m = -\frac{1}{1 + \alpha^2} m \times h_{\text{eff}}(m) - \frac{\alpha}{1 + \alpha^2} \left[(m \cdot h_{\text{eff}})m - |m|^2 h_{\text{eff}} \right] \quad (2.16)$$

$$= -\frac{1}{1 + \alpha^2} m \times h_{\text{eff}}(m) - \frac{\alpha}{1 + \alpha^2} (m \cdot h_{\text{eff}})m + \frac{\alpha}{1 + \alpha^2} |m|^2 h_{\text{eff}}. \quad (2.17)$$

Aus (2.17) folgt unter der Voraussetzung $|m| = 1$ und über die Bildung des Kreuzprodukts mit m

$$\partial_t m \times m = -\frac{1}{1 + \alpha^2} (m \times h_{\text{eff}}) \times m - \frac{\alpha}{1 + \alpha^2} (m \cdot h_{\text{eff}})m \times m + \frac{\alpha}{1 + \alpha^2} h_{\text{eff}} \times m.$$

Unter Verwendung von

$$(m \times h_{\text{eff}}) \times m = -(m \cdot h_{\text{eff}})m + |m|^2 h_{\text{eff}} = -(m \cdot h_{\text{eff}})m + h_{\text{eff}}$$

wird daraus

$$\begin{aligned}
 \partial_t m \times m &= -\frac{1}{1+\alpha^2} \left[-(m \cdot h_{\text{eff}})m + h_{\text{eff}} \right] + \left[-\frac{\alpha}{1+\alpha^2} (m \cdot h_{\text{eff}})m + \frac{\alpha}{1+\alpha^2} h_{\text{eff}} \right] \times m \\
 &= -\frac{1}{1+\alpha^2} h_{\text{eff}} + \frac{1}{1+\alpha^2} (m \cdot h_{\text{eff}})m + \frac{\alpha}{1+\alpha^2} \left[-(m \cdot h_{\text{eff}})m + h_{\text{eff}} \right] \times m \\
 &= -\frac{1}{1+\alpha^2} h_{\text{eff}} + \frac{1}{1+\alpha^2} (m \cdot h_{\text{eff}})m + \frac{\alpha}{1+\alpha^2} h_{\text{eff}} \times m. \tag{2.18}
 \end{aligned}$$

Aus den beiden Formulierungen (2.16) und (2.18) können wir nun die gesuchte Formulierung (2.15) linear kombinieren. Betrachten wir dazu die mit α multiplizierte Gleichung (2.16)

$$\alpha \partial_t m = -\frac{\alpha}{1+\alpha^2} m \times h_{\text{eff}} - \frac{\alpha^2}{1+\alpha^2} \left[(m \cdot h_{\text{eff}})m - h_{\text{eff}} \right], \tag{2.19}$$

und ziehen davon die Gleichung (2.18) ab, so erhalten wir die gesuchte Formulierung (2.15):

$$\alpha \partial_t m - \partial_t m \times m = -\frac{\alpha}{1+\alpha^2} m \times h_{\text{eff}} - \frac{\alpha^2}{1+\alpha^2} (m \cdot h_{\text{eff}})m + \frac{\alpha^2}{1+\alpha^2} h_{\text{eff}} \tag{2.20}$$

$$+ \frac{1}{1+\alpha^2} h_{\text{eff}} - \frac{1}{1+\alpha^2} (m \cdot h_{\text{eff}})m + \frac{\alpha}{1+\alpha^2} m \times h_{\text{eff}} \tag{2.21}$$

$$= h_{\text{eff}} - (m \cdot h_{\text{eff}})m. \tag{2.22}$$

Jetzt zeigen wir noch die umgekehrte Implikation (2.15) \Rightarrow (2.14). Das Kreuzprodukt von (2.15) mit m liefert

$$\alpha \partial_t m \times m - (\partial_t m \times m) \times m = h_{\text{eff}} \times m - (m \cdot h_{\text{eff}})m \times m.$$

Mit Hilfe von

$$(\partial_t m \times m) \times m = (m \cdot \partial_t m)m - |m|^2 \partial_t m = -\partial_t m$$

folgt damit

$$\partial_t m - \alpha m \times \partial_t m = h_{\text{eff}} \times m. \tag{2.23}$$

Um auf die ursprüngliche Formulierung (2.14) zu kommen werden wir die Gleichung (2.23) mit der mit α multiplizierten Gleichung (2.15) addieren

$$\alpha(\alpha \partial_t m + m \times \partial_t m) + \partial_t m - \alpha m \times \partial_t m = \alpha(h_{\text{eff}} - (m \cdot h_{\text{eff}})m) + h_{\text{eff}} \times m.$$

Dies zeigt

$$\alpha^2 \partial_t m + \alpha m \times \partial_t m + \partial_t m - \alpha m \times \partial_t m = \alpha h_{\text{eff}} - \alpha(m \cdot h_{\text{eff}})m + h_{\text{eff}} \times m$$

und damit

$$(1+\alpha^2)\partial_t m = -m \times h_{\text{eff}} + \underbrace{\alpha(m \cdot m)}_{=|m|^2=1} h_{\text{eff}} - \alpha(m \cdot h_{\text{eff}})m.$$

Wenden wir erneut die Graßmann-Identität für das Kreuzprodukt im \mathbb{R}^3 an, so ergibt sich

$$\begin{aligned}\partial_t m &= -\frac{1}{1+\alpha^2} m \times h_{\text{eff}} + \frac{\alpha}{1+\alpha^2} \left[|m|^2 h_{\text{eff}} - (m \cdot h_{\text{eff}}) m \right] \\ &= -\frac{1}{1+\alpha^2} m \times h_{\text{eff}} - \frac{\alpha}{1+\alpha^2} m \times \left[m \times h_{\text{eff}} \right].\end{aligned}$$

Das entspricht wiederum genau der Formulierung (2.14) und damit ist die Äquivalenz von (2.14) und (2.15) gezeigt. □

Unter der Bedingung $|m| = 1$ gilt auch folgende Beobachtung über die Zeitableitung von m .

Lemma 2.6. *Aus der Bedingung $|m| = 1$ folgt, dass die Zeitableitung $v := \partial_t m$ orthogonal auf m steht, also $m \cdot v = 0$.*

Beweis. Sei $|m| = 1$, wir quadrieren die Gleichung, leiten nach t ab und erhalten

$$0 = \frac{d}{dt} 1^2 = \frac{d}{dt} |m|^2 = 2m \cdot \partial_t m = 2m \cdot v.$$

Und aus $0 = 2m \cdot v$ folgt $m \cdot v = 0$, also dass v orthogonal auf m steht. □

Bemerkung. Die Eigenschaft $|m| = 1$ ist in der Formulierung der LLG-Gleichung enthalten, da das Skalarprodukt der LLG-Gleichung mit m sofort $\partial_t m \cdot m = 0$ liefert.

3 Numerisches Verfahren

3.1 Notation/Grundlagen der FEM

Für die Methode der finiten Elemente müssen wir die kontinuierliche Gleichung und deren Definitionsbereich diskretisieren. Dazu sei unsere Menge $\omega \subset \mathbb{R}^2$ ein beschränktes Lipschitz-Gebiet und $\partial\omega$ sei ein Polygon. Weiters sei eine reguläre Triangulierung \mathcal{T} von ω gegeben.

Definition 3.1. Die Menge \mathcal{T} ist eine reguläre Triangulierung von ω genau dann, wenn

- \mathcal{T} eine endliche Menge von kompakten Dreiecken $T = \text{conv}\{z_1, z_2, z_3\}$ mit positiver Grundfläche ist,
- die Vereinigung aller Dreiecke der Triangulierung den Abschluss von ω überdecken, also $\bar{\omega} = \bigcup_{T \in \mathcal{T}} T$,
- der Durchschnitt von unterschiedlichen Dreiecken entweder leer, ein gemeinsamer Knoten, oder eine gemeinsame Kante ist.

Die zugehörige Menge an Knoten einer Triangulierung \mathcal{T} sei \mathcal{N} . Aus dem letzten Punkt folgt unmittelbar, dass die Triangulierung keine hängenden Knoten hat. Der Durchmesser eines Dreiecks $T \in \mathcal{T}$ ist wie folgt definiert

$$\text{diam}(T) := \max_{x, y \in T} |x - y|.$$

Die Gitterweite h ist das Maximum der Durchmesser aller Dreiecke einer Triangulierung, also

$$h = \max_{T \in \mathcal{T}} \text{diam}(T).$$

Das Zeitintervall $(0, T)$ wird in uniforme Zeitschritte $0 = \tau_0 < \tau_1 < \dots < \tau_J = T$ unterteilt mit der Schrittweite $k := \tau_j - \tau_{j-1}$ für $j = 1, \dots, J$. Außerdem bezeichnen wir für jede in der Zeit stetigen Funktion m die Auswertung $m(\tau_j)$ mit m^j .

Um die Magnetisierung m zu diskretisieren, betrachten wir den Raum $\mathcal{S}^1(\mathcal{T}) := \{\phi \in C(\Omega) : \forall T \in \mathcal{T} \ \phi|_T \text{ linear}\}$, genauer den vektorwertigen Raum $\mathcal{V} = \mathcal{S}^1(\mathcal{T})^3$, d.h. den Raum der stückweise linearen und global stetigen vektorwertigen Funktionen.

Um die Bedingung $|m| = 1$ in den Raum, in dem wir unsere Lösung suchen, einfließen zu lassen, sei

$$\mathcal{M} = \{\phi \in \mathcal{V} : |\phi(z)| = 1 \text{ für alle } z \in \mathcal{N}\}.$$

Aus Abschnitt 2.6 wissen wir, dass v im Tangentialraum von m liegt, weshalb wir diesen auch diskret definieren. Für ein fixes $\phi \in \mathcal{M}$ sei

$$\mathcal{K}_\phi = \{\psi \in \mathcal{V} : \psi(z) \cdot \phi(z) = 0 \text{ für alle } z \in \mathcal{N}\}.$$

Wir betrachten auch noch die kanonischen Hutfunktionen $\beta_i \in \mathcal{S}^1(\mathcal{T})$ bezüglich des Knotens $z_i \in \mathcal{N} := \{z_1, \dots, z_N\}$. Diese sind charakterisiert durch $\beta_i(z_j) = \delta_{ij}$ für alle $i, j = 1, \dots, N$. Diese Definition erweitern wir zu $\beta_{i+(\ell-1)N} = \beta_i e_\ell$ für $i = 1, \dots, N$ und $\ell = 1, 2, 3$, wobei $e_\ell \in \mathbb{R}^3$ der ℓ -te Einheitsvektor ist. Dann bildet $\beta_1, \dots, \beta_{3N}$ die kanonische Basis von \mathcal{V} .

3.2 Tangent-Plane-Verfahren

In diesem Abschnitt stellen wir den Algorithmus [5, 6] zum Lösen der zwei-dimensionalen LLG-Gleichung (2.12) vor. Ausgehend von der äquivalenten Formulierung (2.13) betrachten wir dazu die schwache Formulierung der PDE. Dabei identifizieren wir die Zeitableitung m_t mit der diskret berechenbaren Funktion v . Das variationelle Problem ist:

Finde $v^j \in \mathcal{K}_{m^j}$ sodass

$$\begin{aligned} & \alpha \langle v^j, \psi \rangle_\omega + \langle m^j \times v^j, \psi \rangle_\omega + \theta k \langle \nabla v^j, \nabla \psi \rangle_\omega = \\ & - \langle \nabla m^j, \nabla \psi \rangle_\omega + \langle f, \psi \rangle_\omega - \frac{\delta}{\ell_{ex}} \langle \nabla_2 \times m^j, \psi \rangle_\omega - \frac{\delta}{\ell_{ex}} \langle m^j, \nabla_2 \times \psi \rangle_\omega - \frac{\kappa^2}{2} \langle \nabla \phi(m^j), \psi \rangle_\omega \\ & - \left(1 + \frac{\delta^2}{\ell_{ex}^2} \right) \langle m^j \cdot e_3, \psi \cdot e_3 \rangle_\omega \end{aligned} \tag{3.1}$$

für alle Testfunktionen $\psi \in \mathcal{K}_{m^j}$.

Der folgende Algorithmus ist eine Erweiterung der natürlichen Einschrittmethode $m^{j+1} = m^j + kv^j$ um die Normierung der Magnetisierung. Dieses Vorgehen ist notwendig, um die Bedingung $|m| = 1$ an den Knoten zu erfüllen.

Im Algorithmus wird mit $Mesh$ eine Triangulierung der Fläche $\omega \subset \mathbb{R}^2$ bezeichnet, mit $m^0 \in \mathcal{M}$ diskrete Anfangsdaten, mit $\alpha > 0$ der Gilbert-Dämpfungsparameter und mit $0 \leq \theta \leq 1$ der Parameter aus (3.1).

Algorithm 1: Einschrittmethode mit Projektion auf \mathbb{S}^2

Input: $Mesh, m^0, \alpha, \theta$
for $j = 0, \dots, J - 1$ **do**
 $v^j =$ Lösung von (3.1) ;
 $m^{j+1}(z) = \frac{m^j(z) + kv^j(z)}{|m^j(z) + kv^j(z)|}$ für alle $z \in \mathcal{N}$;
end
return m

Nun widmen wir uns der Frage, wie genau wir (3.1) lösen. Dazu schreiben wir die Gleichung wie folgt um: Finde $v^j \in \mathcal{K}_{m^j}$, so dass

$$a(m^j; v^j, \psi) = L(m^j; \psi) \quad \text{für alle } \psi \in \mathcal{K}_{m^j}, \quad (3.2)$$

wobei

$$a(m^j; \phi, \psi) = \alpha \int_{\omega} \phi \cdot \psi + \int_{\omega} (m^j \times \phi) \cdot \psi + \theta k \int_{\omega} \nabla \phi : \nabla \psi, \quad (3.3)$$

$$\begin{aligned} L(m^j; \psi) = & - \underbrace{\int_{\omega} \nabla m^j : \nabla \psi}_{\text{Austauschenergie}} + \underbrace{\int_{\omega} f \cdot \psi}_{\text{Externes Feld}} - \underbrace{\frac{\delta}{\ell_{ex}} \int_{\omega} (\nabla_2 \times m^j) \cdot \psi - \frac{\delta}{\ell_{ex}} \int_{\omega} m^j \cdot (\nabla_2 \times \psi)}_{\text{DMI-Bulk Energie}} \\ & - \underbrace{\frac{\kappa^2}{2} \int_{\omega} \nabla \phi(m^j) \cdot \psi}_{\text{Anisotropie-Energie}} - \underbrace{\left(1 + \frac{\delta^2}{\ell_{ex}^2}\right) \int_{\omega} (m^j \cdot e_3)(\psi \cdot e_3)}_{\text{Streifeld + DMI-Bulk Energie}}. \end{aligned} \quad (3.4)$$

Damit der Algorithmus 1 wohldefiniert ist, bleibt zu zeigen, dass (3.2) eine eindeutige Lösung besitzt und die Projektion im Algorithmus wohldefiniert ist. Diese beiden Aussagen werden in den folgenden Sätzen behandelt.

Satz 3.2. *Seien $a(m^j; v^j, \psi)$ und $L(m^j; \psi)$ wie in (3.3) und (3.4). Dann existiert ein eindeutiges $v^j \in \mathcal{K}_{m^j}$, so dass*

$$a(m^j; v^j, \psi) = L(m^j; \psi) \quad \text{für alle } \psi \in \mathcal{K}_{m^j}. \quad (3.5)$$

Beweis. Halten wir einen beliebigen Zeitpunkt fest, sei also $m^j \in \mathcal{M}$ fix. Wir wollen mithilfe des Lemmas von Lax-Milgram zeigen, dass eine eindeutige Lösung von (3.5) existiert. Folgende Rechnung macht ersichtlich, dass $a(m^j; v^j, \psi)$ gleichmäßig elliptisch ist

$$\begin{aligned} a(m^j; \phi, \phi) &= \alpha \int_{\omega} \phi^2 + \int_{\omega} (m^j \times \phi) \cdot \phi + \theta k \int_{\omega} (\nabla \phi)^2 \\ &= \alpha \|\phi\|_{L^2(\omega)}^2 + \int_{\omega} \underbrace{(\phi \times \phi) \cdot m^j}_{=0} + \theta k \|\nabla \phi\|_{L^2(\omega)}^2. \end{aligned}$$

Damit können wir das Lemma von Lax-Milgram anwenden, welches liefert, dass es eine eindeutige Lösung für das Problem (3.5) gibt. \square

Satz 3.3. *Sei $v^j \in \mathcal{K}_{m^j}$ die eindeutige Lösung von (3.1). Dann folgt, dass $|m^j(z) + kv^j(z)| \neq 0$ ist für alle $z \in \mathcal{N}$. Insbesondere ist die knotenweise Projektion in Algorithmus 1 wohldefiniert.*

Beweis. Da $m^j \in \mathcal{M}$ und $v^j \in \mathcal{K}_{m^j}$ ist, folgt für alle $z \in \mathcal{N}$

$$|m^j(z) + kv^j(z)|^2 = |m^j(z)|^2 + k^2 |v^j(z)|^2 = 1 + k^2 |v^j(z)|^2 \geq 1.$$

Dies beschließt den Beweis. \square

4 Matrix Form

In diesem Kapitel wird die Herleitung der Energiebeiträge in für FEM benötigte Matrizenform erbracht.

4.1 Gleichungssystem

Sei $\{\beta_1, \dots, \beta_{3N}\} \subset \mathcal{V}$ eine Basis. Zu gegebenen $m^j \in \mathcal{M}$ definiere die Matrizen $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{3N \times 3N}$ und $\Lambda^p \in \mathbb{R}^{N \times N}$ durch

$$\mathbf{A}_{i\ell} = a(m^j; \beta_i; \beta_\ell), \quad \Lambda_{i\ell}^p = kh^2 m^j(z_i) \cdot \mathbf{e}_p \delta_{i\ell}$$

und

$$\mathbf{B} = (\Lambda^1, \Lambda^2, \Lambda^3) \in \mathbb{R}^{N \times 3N}. \quad (4.1)$$

Definiere $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^N$ durch

$$\mathbf{b}_i = L(m^j; \beta_i).$$

Dann gilt der folgende Satz:

Satz 4.1. *Die Matrix*

$$\mathbf{E} = \begin{pmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{B}^T \\ \mathbf{B} & \mathbf{0} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{4N \times 4N}$$

ist regulär. Ist $v^j = \sum_{s=1}^{3N} \nu_s \beta_s \in \mathcal{K}_{m^j} \subseteq \mathcal{S}^1(\mathcal{T})^3$ die eindeutige Lösung von (3.5), so existiert ein eindeutiges $\lambda \in \mathbb{R}^N$, sodass

$$\begin{pmatrix} \nu \\ \lambda \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{4N}$$

die eindeutige Lösung von

$$\begin{pmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{B}^T \\ \mathbf{B} & \mathbf{0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \nu \\ \lambda \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{b} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix}. \quad (4.2)$$

ist.

Beweis. Um zu zeigen, dass \mathbf{E} regulär ist, müssen wir nur zeigen, dass $\text{Kern}(\mathbf{E}) = \{0\}$ ist. Seien $y \in \mathbb{R}^{3N}$ und $\mu \in \mathbb{R}^N$ mit

$$\begin{pmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{B}^T \\ \mathbf{B} & \mathbf{0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y \\ \mu \end{pmatrix} = 0.$$

Definiere

$$w^j := \sum_{s=1}^{3N} y_s \beta_s \in \mathcal{V}.$$

Da $\mathbf{B}y = 0$ gilt, ist $w^j \in \mathcal{K}_{m^j}$. Aus $\mathbf{A}y + \mathbf{B}^T\mu = 0$ folgt

$$a(m^j; v^j, v^j) = \underbrace{y \cdot \mathbf{A}y}_{=a(m^j; w^j, w^j)} + \underbrace{y \cdot \mathbf{B}^T\mu}_{=\mathbf{B}y \cdot \mu} = 0.$$

Da $a(m^j; \cdot, \cdot)$ elliptisch ist, folgt $w^j = 0$. Da die Basis $\{\beta_1, \dots, \beta_{3N}\}$ insbesondere linear unabhängig ist, folgt $y = 0$. Damit ist \mathbf{E} regulär.

Für den zweiten Teil des Beweises sei $y \in \mathbb{R}^{3N}, \mu \in \mathbb{R}^N$ so, dass

$$\begin{pmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{B}^T \\ \mathbf{B} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y \\ \mu \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{b} \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Wir definieren wieder

$$w^j := \sum_{s=1}^{3N} y_s \beta_s \in \mathcal{V}.$$

Ferner sei $z \in \mathbb{R}^{3N}$ und

$$\psi := \sum_{s=1}^{3N} z_s \beta_s \in \mathcal{K}_{m^j}.$$

Aus $\mathbf{B}y = 0$ folgt $w^j \in \mathcal{K}_{m^j}$ und aus $\psi \in \mathcal{K}_{m^j}$ folgt $\mathbf{B}z = 0$. Aus $\mathbf{A}y + \mathbf{B}^T\mu = \mathbf{b}$ folgt deshalb

$$a(m^j; v^j, \psi) = \underbrace{z \cdot \mathbf{A}y}_{=a(m^j; w^j, \psi)} + \underbrace{z \cdot \mathbf{B}^T\mu}_{=\mathbf{B}z \cdot \mu} = \underbrace{z \cdot \mathbf{b}}_{=L(m^j; \psi)} = L(m^j, \psi).$$

Somit löst w^j (3.5) und es folgt $w^j = v^j$ also $y = \nu$. □

Wir können also durch das Lösen von (4.2) die Koeffizienten $\nu \in \mathbb{R}^{3N}$ von v^j in der Form

$$v^j = \sum_{s=1}^{3N} \nu_s \beta_s$$

bestimmen.

4.2 Systemmatrix \mathbf{A}

Mit Blick auf Satz 4.1 müssen wir die folgende Matrix berechnen:

$$\mathbf{A} = \alpha \mathbf{M} + \mathbf{S} + \theta k \mathbf{K}. \tag{4.3}$$

Die Form (4.3) folgt über die Definition mit der Basis $\{\beta_1, \dots, \beta_{3N}\}$ natürlich aus (3.3). Im Folgenden schauen wir uns die Berechnung von \mathbf{M} , \mathbf{S} und \mathbf{K} genauer an.

4.2.1 Massenmatrix \mathbf{M}

Die Massenmatrix \mathbf{M} kommt aus dem ersten Term der Bilinearform $a(m^j; \phi, \psi)$, also aus $\alpha \int_{\omega} \phi \cdot \psi$. Erinnern wir uns, dass gilt $\beta_{i+(p-1)N} = e_p \beta_i$ mit $i = 1, \dots, N$ und $p = 1, 2, 3$, wobei β_i die zum Knoten i assoziierte Hutfunktion ist. Dann liest sich der erste Term für $s = i + (p-1)N$ und $t = \ell + (q-1)N$ wie folgt:

$$\alpha \mathbf{M}_{ts} = \alpha \int_{\omega} \beta_s \cdot \beta_t \quad (4.4)$$

$$= \alpha \int_{\omega} \beta_{i+(p-1)N} \cdot \beta_{\ell+(q-1)N} \quad (4.5)$$

$$= \alpha \int_{\omega} e_p \cdot e_q \beta_i \beta_{\ell} \quad (4.6)$$

$$= \alpha \delta_{pq} \int_{\omega} \beta_i \beta_{\ell} \quad (4.7)$$

$$= \alpha \delta_{pq} \mathbf{M}_{\ell i}^0, \quad (4.8)$$

wobei $\mathbf{M}^0 \in \mathbb{R}^{N \times N}$ die skalare Massenmatrix ist. Die Massenmatrix \mathbf{M} hat bedingt durch δ_{pq} in (4.8) somit folgende Blockdiagonalgestalt

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} \mathbf{M}^0 & 0 & 0 \\ 0 & \mathbf{M}^0 & 0 \\ 0 & 0 & \mathbf{M}^0 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{3N \times 3N}.$$

4.2.2 Schiefsymmetrische Matrix \mathbf{S}

Die Schiefsymmetrische Matrix $\mathbf{S} = \mathbf{S}(m^j)$ entspricht dem zweiten Term der Bilinearform $a(m^j; \phi, \psi)$. Für die Berechnung beobachten wir zuerst Folgendes. Mit der Identität $(a \times b) \cdot c = (b \times c) \cdot a$ folgt aus dem zweiten Term

$$\mathbf{S}_{ts} := \int_{\omega} (m^j \times \beta_s) \cdot \beta_t = \int_{\omega} (\beta_s \times \beta_t) \cdot m^j.$$

Jetzt verwenden wir die Basisdarstellung der FEM-Magnetisierung

$$m^j = \sum_{r=1}^{3N} x_r \beta_r, \quad (4.9)$$

um mit $s = i + (p-1)N$, $t = \ell + (q-1)N$, $r = g + (n-1)N$ Folgendes zu erhalten:

$$\int_{\omega} (\beta_s \times \beta_t) \cdot m^j = \sum_{n=1}^3 \sum_{g=1}^N x_{g+(n-1)N} \int_{\omega} (\beta_{i+(p-1)N} \times \beta_{\ell+(q-1)N}) \cdot \beta_{g+(n-1)N}.$$

Aus der Definition der β folgt

$$(\beta_{i+(p-1)N} \times \beta_{\ell+(q-1)N}) \cdot \beta_{g+(n-1)N} = (e_p \times e_q) \cdot e_n \beta_i \beta_{\ell} \beta_g$$

und damit

$$\mathbf{S}_{ts} = \sum_{n=1}^3 \underbrace{(\mathbf{e}_p \times \mathbf{e}_q) \cdot \mathbf{e}_n}_{\varepsilon_{pqn}} \sum_{g=1}^N x_{g+(n-1)N} \underbrace{\int_{\omega} \beta_i \beta_{\ell} \beta_g}_{=:(D^g)_{i\ell}}, \quad (4.10)$$

wobei ε_{pqn} das Levi-Civita-Symbol ist und $D^g \in \mathbb{R}^{N \times N}$.

4.2.3 Steifigkeitsmatrix \mathbf{K}

Die Steifigkeitsmatrix \mathbf{K} kommt aus dem letzten Term der Bilinearform $a(m^j; \phi, \psi)$ und unter Verwendung der Definition der Basis $\boldsymbol{\beta}$ von \mathcal{V} folgt für $s = i + (p-1)N$ und $t = \ell + (q-1)N$:

$$\begin{aligned} \theta k \mathbf{K}_{ts} &= \theta k \int_{\omega} \nabla \boldsymbol{\beta}_s : \nabla \boldsymbol{\beta}_t \\ &= \theta k \int_{\omega} \nabla \boldsymbol{\beta}_{i+(p-1)N} : \nabla \boldsymbol{\beta}_{\ell+(q-1)N} \\ &= \theta k \int_{\omega} \mathbf{e}_p \cdot \mathbf{e}_q \nabla \beta_i \cdot \nabla \beta_{\ell} \\ &= \theta k \delta_{pq} \int_{\omega} \nabla \beta_i \cdot \nabla \beta_{\ell} \\ &= \theta k \delta_{pq} \mathbf{K}_{i\ell}^0, \end{aligned}$$

wobei $\mathbf{K}^0 \in \mathbb{R}^{N \times N}$ die skalare Steifigkeitsmatrix bezeichnet. Die Steifigkeitsmatrix \mathbf{K} hat, ebenso wie die Massenmatrix, Blockdiagonalgestalt

$$\mathbf{K} = \begin{pmatrix} \mathbf{K}^0 & 0 & 0 \\ 0 & \mathbf{K}^0 & 0 \\ 0 & 0 & \mathbf{K}^0 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{3N \times 3N}.$$

4.3 Resultatvektor \mathbf{b}

Der Resultatvektor $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^{3N}$ setzt sich aus den verschiedenen Energiebestandteilen des Funktionals $L(m^j; \psi)$ zusammen, also

$$\mathbf{b} = \mathbf{b}_{ex} + \mathbf{b}_{ext} + \mathbf{b}_{DMI} + \mathbf{b}_{ani} + \mathbf{b}_{stray}.$$

Auch hier folgt die Formulierung also direkt aus (3.4).

4.3.1 Steifigkeitsmatrix

Die Austauschenergie tritt im Term $-\int_{\omega} \nabla m^j : \nabla \psi$ in Form der schon bekannten Steifigkeitsmatrix \mathbf{K} auf. Damit können wir den Beitrag der Austauschenergie am Resultatvektor \mathbf{b} ausdrücken als

$$\mathbf{b}_{ex} = -\mathbf{K}x \quad \text{mit} \quad m^j = \sum_{j=1}^{3N} x_j \boldsymbol{\beta}_j.$$

4.3.2 Externes Feld

Das Externe Feld leistet mit dem Term $\int_{\omega} f \cdot \psi$ seinen Beitrag im Resultatvektor, dieser wird auf den bestehenden Vektor \mathbf{b} aufaddiert und für $s = i + (p-1)N$ wie folgt berechnet

$$\int_{\omega} f \cdot \beta_s = \int_{\omega} f \cdot \beta_{i+(p-1)N} = \int_{\omega} f \cdot e_p \beta_i = \int_{\omega} f_p \beta_i = \mathbf{f}_p.$$

Dabei ist $\mathbf{f}_p \in \mathbb{R}^N$ und der Anteil des externen Feldes an \mathbf{b} ist damit

$$\mathbf{b}_{ext} = \begin{bmatrix} \mathbf{f}_1 \\ \mathbf{f}_2 \\ \mathbf{f}_3 \end{bmatrix}.$$

4.3.3 DMI-Bulk Matrix

Die DMI-Bulk Energie wollen wir über die Matrix \mathbf{G} und \mathbf{G}^T in den Resultatvektor einfließen lassen. Unser Ziel ist es also die Matrix $\mathbf{G} \in \mathbb{R}^{3N \times 3N}$ aufzustellen, welche folgendes erfüllt

$$\frac{\delta}{\ell_{ex}} \mathbf{G}_{st} = \frac{\delta}{\ell_{ex}} \int_{\omega} (\nabla_2 \times \beta_s) \cdot \beta_t.$$

Die Matrix \mathbf{G} berechnet sich für $s = i + (p-1)N$, $t = \ell + (q-1)N$ somit wie folgt

$$\begin{aligned} \frac{\delta}{\ell_{ex}} \mathbf{G}_{st} &= \frac{\delta}{\ell_{ex}} \int_{\omega} (\nabla_2 \times \beta_s) \cdot \beta_t \\ &= \frac{\delta}{\ell_{ex}} \sum_{w=1}^2 \int_{\omega} (e_w \times \partial_w \beta_s) \cdot \beta_t \\ &= \frac{\delta}{\ell_{ex}} \sum_{w=1}^2 \int_{\omega} (e_w \times \partial_w \beta_i e_p) \cdot \beta_{\ell} e_q \\ &= \frac{\delta}{\ell_{ex}} \sum_{w=1}^2 \underbrace{(e_w \times e_p) \cdot e_q}_{\varepsilon_{wpq}} \underbrace{\int_{\omega} \partial_w \beta_i \beta_{\ell}}_{(H^w)_{i\ell}}. \end{aligned}$$

Die Struktur von \mathbf{G} ist damit

$$\mathbf{G} = \begin{pmatrix} 0 & -H^3 & H^2 \\ H^3 & 0 & -H^1 \\ -H^2 & H^1 & 0 \end{pmatrix} \quad (4.11)$$

mit den Matrizen $H^w \in \mathbb{R}^{N \times N}$. Der Beitrag der DMI-Bulk Energie am Resultatvektor lässt sich also wie folgt schreiben

$$\mathbf{b}_{DMI} = -(\mathbf{G} + \mathbf{G}^T)x \quad \text{mit } m^j = \sum_{j=1}^{3N} x_j \beta_j.$$

4.3.4 Anisotropie-Energie

Wir wollen eine uniaxiale Anisotropie-Energie annehmen, also $\phi : \mathbb{S}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ und $\phi(m) = -(m \cdot \mathbf{a})^2$ mit $\mathbf{a} \in \mathbb{S}^2$. Die Anisotropie-Energie ist also für $s = i + (p-1)N$ und $m^j = \sum_t x_t \beta_t$ gegeben durch

$$\begin{aligned}
 (\mathbf{b}_{ani})_s &= -\frac{\kappa^2}{2} \int_{\omega} \nabla(-m^j \cdot \mathbf{a})^2 \cdot \beta_s \\
 &= -\frac{\kappa^2}{2} \int_{\omega} 2(-m^j \cdot \mathbf{a}) \mathbf{a} \cdot \beta_s \\
 &= \kappa^2 \int_{\omega} (m^j \cdot \mathbf{a}) \mathbf{a} \cdot \beta_s \\
 &= \kappa^2 \sum_{q=1}^3 \sum_{\ell=1}^N x_{\ell+(q-1)N} \int_{\omega} \beta_{\ell} (\mathbf{e}_q \cdot \mathbf{a}) (\mathbf{a} \cdot \mathbf{e}_p) \beta_i \\
 &= \kappa^2 \sum_{q=1}^3 \sum_{\ell=1}^N x_{\ell+(q-1)N} \mathbf{a}_q \mathbf{a}_p \int_{\omega} \beta_{\ell} \beta_i \\
 &= \kappa^2 \sum_{q=1}^3 \sum_{\ell=1}^N x_{\ell+(q-1)N} (\mathbf{a} \otimes \mathbf{a})_{qp} \mathbf{M}_{i\ell}^0
 \end{aligned}$$

wobei $\mathbf{M}^0 \in \mathbb{R}^{N \times N}$ die skalare Massenmatrix bezeichnet. Es gilt also, dass

$$\mathbf{b}_{ani} = \kappa^2 C(\mathbf{a}) x \quad \text{mit } m^j = \sum_{j=1}^{3N} x_j \beta_j,$$

mit $C(\mathbf{a}) = (\mathbf{a} \otimes \mathbf{a}) \otimes \mathbf{M}^0$. Wobei \otimes das Kronecker-Produkt bezeichnet, siehe (1.1).

4.3.5 Streufeld + DMI-Bulk Energie

Das Streufeld mit einem weiteren Anteil der DMI-Bulk Energie hat mit $\int_{\omega} (m^j \cdot \mathbf{e}_3)(\psi \cdot \mathbf{e}_3)$ dieselbe Form wie die Anisotropie-Energie, womit wir den Anteil schreiben können als

$$\mathbf{b}_{stray} = -\left(1 + \frac{\delta^2}{\ell_{ex}^2}\right) C(\mathbf{e}_3) x \quad \text{mit } m^j = \sum_{j=1}^{3N} x_j \beta_j.$$

5 Implementierung

Im Folgenden werden wir uns die explizite Berechnung der Energiebestandteile genauer anschauen. Dafür werden wir oft das folgende Lemma verwenden:

Lemma 5.1 (Φ_T -Lemma). *Sei $T = \text{conv}\{z_0, z_1, z_2\}$ ein Dreieck mit $|T| > 0$. Definiere*

$$\Phi_T(s, t)^T := (z_1 - z_0, z_2 - z_0)(s, t)^T + z_0. \quad (5.1)$$

Dann ist $\Phi_T : T_{ref} \rightarrow T$ ein Diffeomorphismus mit $\Phi_T(0, 0)^T = z_0$, $\Phi_T(1, 0)^T = z_1$, $\Phi_T(0, 1)^T = z_2$ und $|\det D\Phi_T(s, t)^T| = 2|T|$.

Beweis. Durch Einsetzen ist

$$|\det D\Phi_t(s, t)^T| = |\det \begin{pmatrix} z_1 - z_0 & z_2 - z_0 \end{pmatrix}| = 2|T| > 0 \quad (5.2)$$

sofort ersichtlich. Die Identitäten $\Phi_T(0, 0)^T = z_0$, $\Phi_T(1, 0)^T = z_1$ und $\Phi_T(0, 1)^T = z_2$ sind auch durch Einsetzen klar.

Da Φ_T eine affine Abbildung ist, ist sie bijektiv genau dann, wenn ihr linearer Anteil bijektiv ist. Da wir in (5.2) schon gezeigt haben, dass der lineare Anteil bijektiv ist daher die affine Abbildung Φ_T auch bijektiv. Es existieren sowohl Ableitung als auch die Ableitung der Umkehrabbildung, also ist Φ_t ein Diffeomorphismus. □

5.1 Massenmatrix \mathbf{M} und Steifigkeitsmatrix \mathbf{K}

Um die Elemente der Massenmatrix \mathbf{M} zu berechnen sei zuerst auf folgende, durch die FEM bedingte Darstellungsweise hingewiesen, welche wir noch häufig verwenden werden

$$\int_{\omega} \beta_i \beta_\ell = \sum_{T \in \mathcal{T}} \int_T \beta_i \beta_\ell.$$

Wir betrachten also das Integral $\int_T \beta_i \beta_k$, wobei β_i die zum Knoten i assoziierte Hutfunktion ist. Für die Implementierung werden wir über jedes Dreieck in der Triangulierung iterieren und die lokale Massenmatrix $\mathbf{M}_T \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$ berechnen. Die Einträge dieser lokalen Massenmatrix korrespondieren mit den Knoten des zugehörigen Dreiecks. Diese lokalen Massenmatrizen werden anschließend aufaddiert, um die Massenmatrix \mathbf{M} zu berechnen.

Für die Berechnung des Integrals betrachten wir eine Parameter-Transformation $\Phi_T : T_{ref} \rightarrow T$, welche das Referenzdreieck $T_{ref} = \text{conv}\{(0, 0), (1, 0), (0, 1)\}$ auf das Dreieck T projiziert. Aus der Symmetrie der lokalen Massenmatrix müssen wir nicht neun verschiedene Einträge berechnen, sondern nur sechs, und da wir nach Lemma 5.1 den Diffeomorphismus

Φ_T frei wählen dürfen reduziert sich die Berechnung auf zwei Einträge, nämlich ob der Eintrag auf der Hauptdiagonale liegt oder nicht.

Falls $i \neq \ell$, so folgt

$$\begin{aligned} \int_T \beta_i \beta_\ell &= \int_{T_{ref}} \beta_i \circ \Phi_T(s, t) \beta_\ell \circ \Phi_T(s, t) |\det D\Phi_T| d(s, t) \\ &= 2|T| \int_0^1 \int_0^{1-s} st \, dt ds = |T| \int_0^1 s(1-s)^2 ds = \frac{|T|}{12}. \end{aligned}$$

Und falls $i = \ell$, so gilt

$$\begin{aligned} \int_T \beta_i \beta_i &= \int_{T_{ref}} \beta_i \circ \Phi_T(s, t) \beta_i \circ \Phi_T(s, t) |\det D\Phi_T| d(s, t) \\ &= 2|T| \int_0^1 \int_0^{1-s} s^2 \, dt ds = 2|T| \int_0^1 s^3 - s^2 ds = \frac{|T|}{6}. \end{aligned}$$

Die lokale Massenmatrix eines beliebigen Dreiecks T ist also gegeben durch

$$\mathbf{M}_T = \frac{|T|}{12} \begin{pmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 2 \end{pmatrix}.$$

Für die Steifigkeitsmatrix verwenden wir dieselbe FEM Darstellung des Integrals $\int_\omega \nabla \phi_i \cdot \nabla \phi_\ell$, können allerdings, da die Ableitung der Hutfunktionen konstant ist, sofort folgern, dass

$$\int_\omega \nabla \beta_i \cdot \nabla \beta_\ell = \sum_{T \in \mathcal{T}} \int_T \nabla \beta_i \cdot \nabla \beta_\ell = \sum_{T \in \mathcal{T}} |T| \nabla \beta_i \cdot \nabla \beta_\ell$$

ist. Die skalare Steifigkeitsmatrix $\mathbf{K}^0 \in \mathbb{R}^{N \times N}$ ist also gegeben durch

$$\mathbf{K}_{i\ell}^0 = \sum_{T \in \mathcal{T}} \underbrace{|T| \nabla \beta_i \cdot \nabla \beta_\ell}_{=: \mathbf{K}_T},$$

wobei $\mathbf{K}_T \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$ wie in der FEM üblich berechnet werden kann.

5.2 Schiefsymmetrische Matrix S

Die Blockmatrizen $D^g \in \mathbb{R}^{N \times N}$, welche gegeben sind durch

$$D_{i\ell}^g = \int_\omega \beta_i \beta_\ell \beta_g = \sum_{T \in \mathcal{T}} \int_T \beta_i \beta_\ell \beta_g,$$

müssen für alle $g = 1, \dots, N$ berechnet werden und dann zur Matrix \mathbf{S} zusammengesetzt werden. Betrachten wir, wie ε_{pqn} die schiefsymmetrische Matrix \mathbf{S} beeinflusst. Dazu bezeichne $D^g x^n$, $n \in 1, 2, 3$ die Matrix

$$(D^g x^n)_{i\ell} = \sum_{g=1}^N x_{g+(n-1)N} \int_{\omega} \beta_i \beta_{\ell} \beta_g \in \mathbb{R}^{N \times N}.$$

Dann hat die schiefsymmetrische Matrix \mathbf{S} folgende Blockgestalt

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} 0 & -D^g x^3 & D^g x^2 \\ D^g x^3 & 0 & -D^g x^1 \\ -D^g x^2 & D^g x^1 & 0 \end{pmatrix}$$

Nun widmen wir uns den Blockmatrizen D^g und wie wir sie berechnen. Wir wollen $\int_T \beta_i \beta_k \beta_{\ell}$ als geschlossene Formel ausdrücken, dazu brauchen wir eine Fallunterscheidung

1. $i = \ell = g$, in diesem Fall und mit derselben Parameter-Transformation wie für \mathbf{M} folgt

$$\int_T \beta_i \beta_{\ell} \beta_g = \int_T \beta_i^3 = \int_{T_{ref}} s^3 |\det D\Phi_T| d(s, t) = 2|T| \int_0^1 s^3 (1-s) ds = \frac{|T|}{10}$$

2. $i = g \neq \ell$, wie in Fall 1. folgt o.B.d.A.

$$\int_T \beta_i \beta_{\ell} \beta_g = \int_T \beta_i^2 \beta_{\ell} = 2|T| \int_0^1 \int_0^{1-s} s^2 t dt ds = |T| \int_0^1 s^2 (1-s)^2 ds = \frac{|T|}{30}$$

3. i, ℓ, g paarweise verschieden, hier verwenden wir folgende Eigenschaft der Transformation

$$\Phi_T((0, 0)) = 1 - s - t.$$

$$\begin{aligned} \int_T \beta_i \beta_{\ell} \beta_g &= 2|T| \int_0^1 \int_0^{1-s} st(1-s-t) dt ds \\ &= \int_0^1 \int_0^{1-s} st dt ds - \int_0^1 \int_0^{1-s} s^2 t dt ds - \int_0^1 \int_0^{1-s} st^2 dt ds \\ &= \frac{|T|}{12} - \frac{2|T|}{30} = \frac{|T|}{60}. \end{aligned}$$

Diese drei Fälle sind ausreichend die lokalen Integrale $\int_T \beta_i \beta_{\ell} \beta_g$ zu bestimmen, das folgt aus der Freiheit den Diffeomorphismus Φ_T frei wählen zu können.

5.3 Lagrange Multiplikator

Die Systemmatrix \mathbf{B} wird wie in Abschnitt 4.1 zu einem Gleichungssystem zusammengesetzt und in jedem Schritt des Algorithmus 1 gelöst.

5.4 Externes Feld

Sei eine Quadraturformel $Q_n : T_{ref} \rightarrow \mathbb{R}$ auf dem Referenzdreieck T_{ref} gegeben. Das Integral $\int_{\omega} f \cdot e_p \beta_i$, wieder als Summe über die Dreiecke der Triangulierung aufgefasst, können wir mithilfe dieser Quadratur berechnen. Wenn wir $e_p f$ also den p -ten Eintrag der Funktion f als f_p bezeichnen, dann können wir mit der Transformation auf das Referenzdreieck $T_{ref} = \text{conv}\{(0,0), (1,0), (0,1)\}$ folgendermaßen vereinfachen

$$\begin{aligned} \int_T e_p f \beta_i &= \int_{T_{ref}} f_p \circ \Phi_T(s, t) \beta_i \circ \Phi_T(s, t) |\det D\Phi_T(s, t)| d(s, t) \\ &= 2|T| \int_0^1 \int_0^{1-s} s f_p(\Phi_T(s, t)) dt ds. \end{aligned}$$

Dieses Integral können wir mit der Quadraturregel Q_n berechnen. Sei dazu $\Phi_T : T_{ref} \rightarrow T$, $(x, y)^T \mapsto A(x, y)^T + b$, wobei $A \in \mathbb{R}^{2 \times 2}$ und $b \in \mathbb{R}^2$ der Diffeomorphismus aus Lemma 5.1. Für ein Dreieck $T = \text{conv}\{z_0, z_1, z_2\}$ ist die Transformation gegeben durch

$$b = z_0, \quad A = \begin{pmatrix} z_1 - b & z_2 - b \end{pmatrix}.$$

Damit können wir unser Integral wie folgt approximieren

$$\int_T f_p \beta_i \approx 2|T| \sum_{i=1}^n w_i x_i f_p(A((x_i, y_i)^T) + b). \quad (5.3)$$

Dabei ist n die Anzahl der Punkte in der vorgegebenen Quadratur Q_n , w_i , $i = 1, \dots, n$ die Gewichte der Quadratur, $(x_i, y_i)^T$, $i = 1, \dots, n$ die Auswertungsstellen der Quadratur.

5.5 DMI Bulk Energie

Die Matrix \mathbf{G} besteht aus den Blockmatrizen $H^w \in \mathbb{R}^{N \times N}$ mit $w \in \{1, 2, 3\}$, diese werden berechnet durch

$$\begin{aligned}
 (H^w)_{i\ell} &= \sum_{T \in \mathcal{T}} \int_T \partial_w \beta_i \beta_\ell \\
 &= \sum_{T \in \mathcal{T}} \partial_w \beta_i \int_0^1 \int_0^{1-s} s 2|T| dt ds \\
 &= \sum_{T \in \mathcal{T}} 2|T| \partial_w \beta_i \int_0^1 s - s^2 ds \\
 &= \sum_{T \in \mathcal{T}} \frac{|T|}{3} \partial_w \beta_i.
 \end{aligned}$$

Die Ableitungen der Hutfunktionen β_i sind konstante Funktionen. Für ein fixes Element lässt sich die Ableitung also aus dem Gradienten der Hutfunktion berechnen.

5.6 Anisotropie-Energie

Wir bestimmen $C(\mathbf{a})$ und multiplizieren diese Matrix mit m um den Beitrag der Anisotropie-Energie auf der rechten Seite zu bestimmen. Für ein $\mathbf{a} = (a_1, a_2, a_3)^T \in \mathbb{R}^3$ folgt somit

$$\mathbf{a} \otimes \mathbf{a} = \begin{pmatrix} a_1 a_1 & a_2 a_1 & a_3 a_1 \\ a_1 a_2 & a_2 a_2 & a_3 a_2 \\ a_1 a_3 & a_2 a_3 & a_3 a_3 \end{pmatrix}.$$

Und $C(\mathbf{a}) \in \mathbb{R}^{3N \times 3N}$ berechnet sich damit wie folgt

$$C(\mathbf{a}) = \begin{pmatrix} a_1 a_1 M^0 & a_2 a_1 M^0 & a_3 a_1 M^0 \\ a_1 a_2 M^0 & a_2 a_2 M^0 & a_3 a_2 M^0 \\ a_1 a_3 M^0 & a_2 a_3 M^0 & a_3 a_3 M^0 \end{pmatrix}.$$

5.7 Streufeld + DMI-Bulk Energie

Das Streufeld, sowie ein Teil der DMI-Bulk Energie sind ebenfalls noch in der rechten Seite \mathbf{b} vorhanden. Dieser Term hat jedoch dieselbe Form, wie die uniaxiale Anisotropie-Energie mit $\mathbf{a} = \mathbf{e}_3$. Damit unterscheiden sich die beiden Terme nur im Faktor. Also ziehen wir von der rechten Seite \mathbf{b} nur eine skalierte Kopie des Beitrags der Anisotropie-Energie ab.

6 Numerische Experimente

Der oben beschriebene Algorithmus für die Berechnung der zwei-dimensionalen LLG-Gleichung mittels FEM wurde in MATLAB implementiert¹. Mithilfe der Implementierung wurden folgende numerische Experimente durchgeführt.

6.1 Experiment 1

In Experiment 1 wurden die Endzustände einer magnetischen Scheibe abhängig von Durchmesser und externem Feld kartographiert. Dabei wurde einmal von einer uniformen Magnetisierung ausgegangen und von zwei unterschiedlichen zufälligen Magnetisierungen.

6.1.1 Aufbau

Das erste Experiment ist angelehnt an den Artikel [7], in welchem ein Phasendiagramm der magnetischen Endzustände einer drei-dimensionalen Scheibe mit 10nm Dicke erstellt wird. Wir werden die Berechnung eines Phasendiagramms für eine zwei-dimensionale Scheibe reproduzieren. Für das Experiment wurde der Durchmesser d der magnetischen Scheibe mit $d = 80, 100, 120, 140, 160, 180, 200\text{nm}$ variiert und zu jeder dieser Scheibengrößen sechs verschiedene externe Felder simuliert mit einer Stärke von $\mu_0 H$ zwischen $0T$ und $1, 2T$ in $0, 2T$ Schrittweiten. Die Richtung des externen Feldes wurde dabei außerhalb der Ebene angenommen, also in Richtung $(0, 0, H_{max})$. Die Materialparameter sind für eine Eisen-Germanium Legierung (FeGe) gewählt und sind $M_s = 3,84 \cdot 10^5 [A/m]$, $A = 8,78 \cdot 10^{-12} [J/m]$ und $D = 1,58 \cdot 10^{-3} [J/m^2]$. In diesem Experiment wird die Anisotropie vernachlässigt, indem die Anisotropiekonstante K gleich null gesetzt wird. Aus der 2D-Approximation des Streufeldes ergibt sich dennoch eine Anisotropie.

Ausgehend von zwei Anfangsmagnetisierungen werden die Simulationen für eine Nanosekunde (10^{-9}s) mit einer Schrittweite von $0,1$ Pikosekunden (10^{-12}s) durchgeführt. Dieser Zeitraum ist ausreichend, um einen die Energie minimierenden, stabilen Endzustand zu erreichen. Um diesen Endzustand schnell zu erreichen, wird der Gilbert-Dämpfungsparameter α gleich 1 gesetzt. Als Anfangsmagnetisierungen werden die uniforme Magnetisierung, $m^0 = (0, 0, 1)$ für alle Knoten, sowie zwei fixe zufällige Magnetisierung für jeden Durchmesser verwendet. Der größte Abstand zwischen zwei beliebigen Knoten h_{max} , ist in Tabelle 6.1 zu sehen. Dabei ist zu beachten, dass die Austauschlänge $\ell_{ex} = \sqrt{2A/\mu_0 M_s^2} = 9,7334\text{nm}$ ist und damit doppelt so groß wie der größte Abstand zwischen zwei Knoten h_{max} . Das führt in der Regel zu zuverlässigen Ergebnissen bei der Simulation.

¹Der Code ist verfügbar unter <https://github.com/student1083/2DLLG>

Durchmesser [nm]	h_{max} [nm]	Anzahl der Elemente	Anzahl der Knoten
60	4,4520	846	458
80	4,4146	1354	720
100	4,4594	2142	1124
120	4,4669	3706	1922
140	4,4299	5062	2612
160	4,4144	7062	3626
180	4,4183	7924	4063
200	4,4586	10120	5173

Tabelle 6.1: Maximaler Abstand zwischen zwei Knoten, Elementanzahl und Knotenanzahl abhängig von dem Durchmesser der Scheibe.

6.1.2 Resultate

Ausgehend von einer uniformen Anfangsmagnetisierung haben sich zwei unterschiedliche Ausgangszustände ausgebildet. Ein vollständiges Skymion (Sk) und ein unvollständiger Skymion (iSk). Das zugehörige Phasendiagramm ist in Abbildung 6.1 dargestellt. In Abbildung 6.3 sind für alle Endzustände die Magnetisierung in die Z-Komponente dargestellt. Dabei ist der Unterschied zwischen unvollständigen und vollständigen Skymionen klar ersichtlich. Eine Visualisierung der Unterschiede zwischen den beiden Zuständen ist in Abbildung 6.2 zu sehen.

Ausgehend von zwei zufälligen Anfangsmagnetisierungen hat sich eine weit größere Vielfalt an Zuständen ausgebildet. Schnitte für die erste und zweite zufällige Anfangsmagnetisierung sind in Abbildung 6.4 zu sehen. Aufgrund der unterschiedlichen Anfangsmagnetisierungen für jeden Scheibendurchmesser ist es nicht möglich ein einheitliches Phasendiagramm zu erstellen. Allerdings lässt sich die Auswirkung des gesteigerten externen Feldes auf eine Magnetisierung deutlich zeigen, wie in Abbildung 6.5 für die erste zufällige Magnetisierung der Scheibe mit 120nm Durchmesser und in Abbildung 6.6 für die zweite zufällige Magnetisierung der Scheibe mit 180nm Durchmesser zu erkennen ist. In beiden Fällen führt das gesteigerte externe Feld zu einer stärkeren Ausrichtung des Zustandes in die positive Z-Richtung.

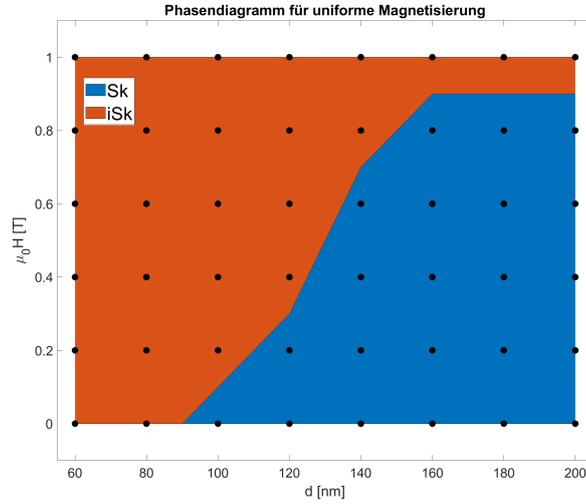


Abbildung 6.1: Phasendiagramm für eine uniforme Ausgangsmagnetisierung für das Experiment aus Abschnitt 6.1. Wir plotten die Ausprägung des Endzustandes (Skyrmion (Sk) vs. unvollständiges Skyrmion (iSk)) in Abhängigkeit von Durchmesser d und dem äußeren Feld.

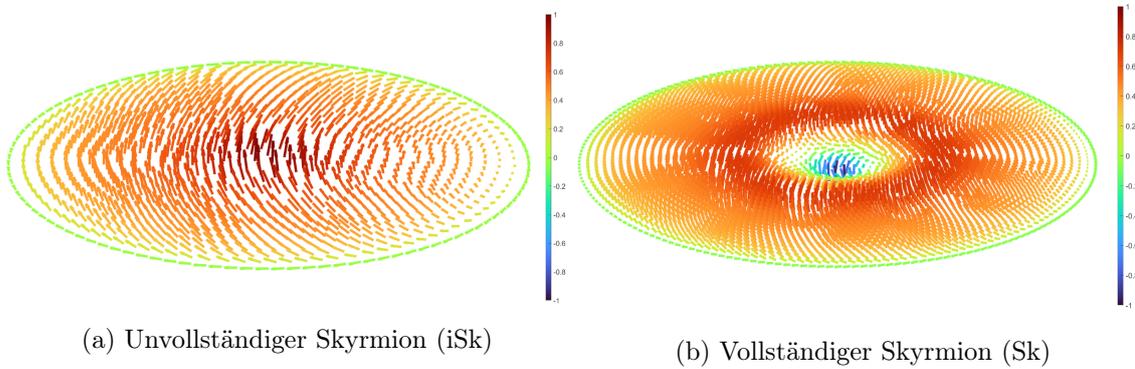


Abbildung 6.2: Unterschied zwischen unvollständigem und vollständigem Skyrmion. Der unvollständige Skyrmion in Abbildung 6.2a hat sich aus der Relaxierung einer uniformen Scheibe mit einem Durchmesser von 120nm und $\mu_0 H(T) = 0.4$ in Experiment 1 gebildet. Der vollständige Skyrmion in Abbildung 6.2b hat sich aus demselben Experiment mit einer Scheibe von Durchmesser 180nm und einer externen Feldstärke von $\mu_0 H(T) = 0.6$ gebildet.

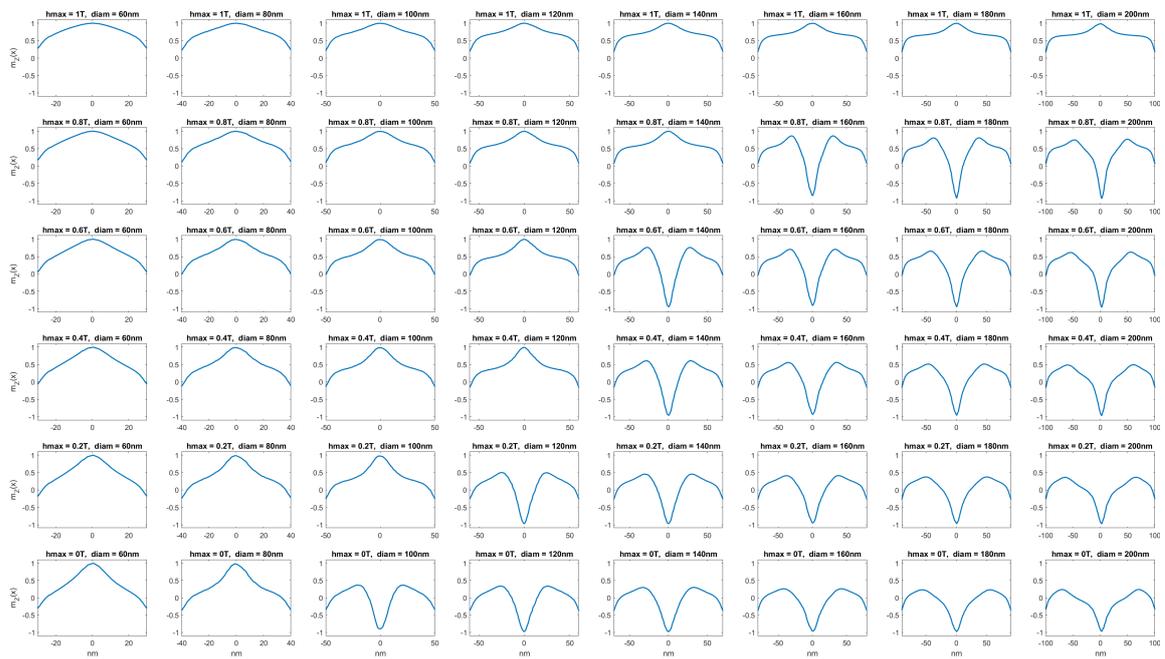
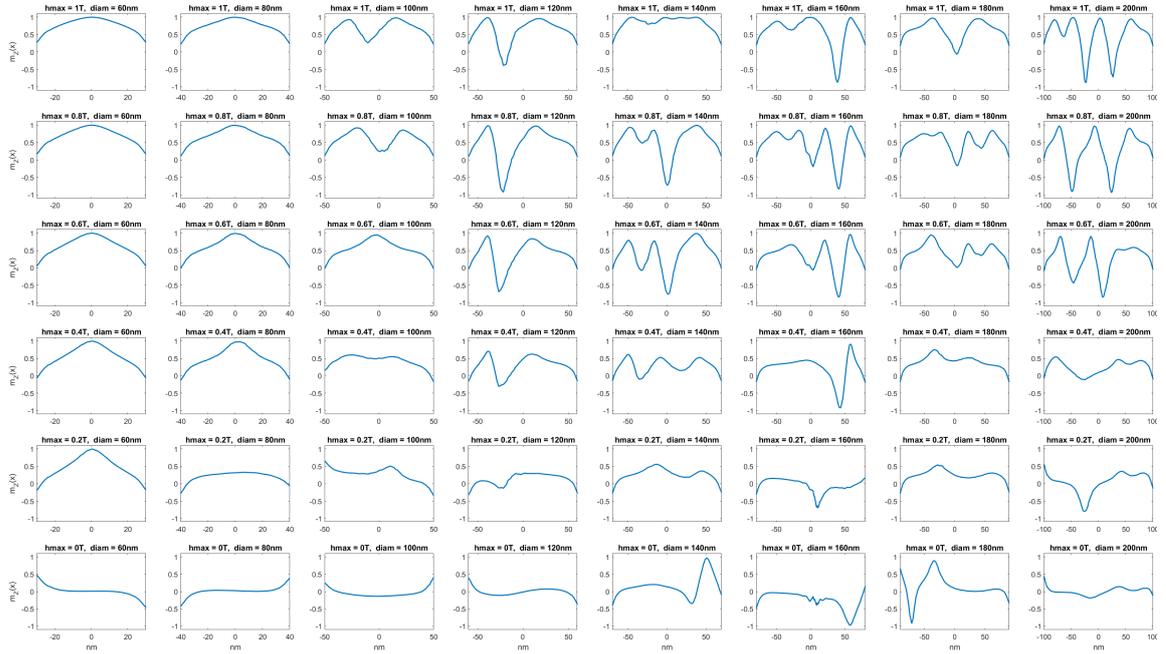
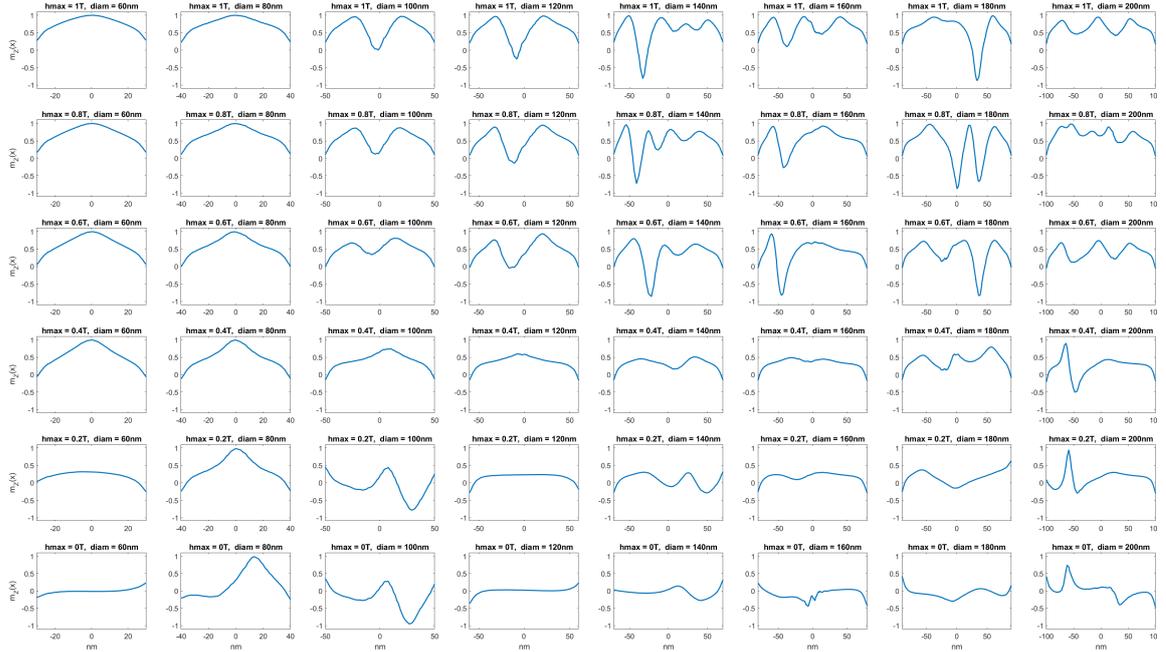


Abbildung 6.3: Schnitt der Z-Magnetisierung durch die X-Achse für uniforme Anfangsmagnetisierungen. Jeder Schnitt entspricht einem Punkt des Phasendiagramms in Abbildung 6.1. Die Auslenkung der Magnetisierung in Z-Richtung ist gegenüber dem Durchmesser abgebildet.

6 Numerische Experimente



(a) Erste zufällige Anfangsmagnetisierung



(b) Zweite zufällige Anfangsmagnetisierung

Abbildung 6.4: Schnitt der Z-Magnetisierung durch die X-Achse der beiden zufälligen Anfangsmagnetisierungen. Wie in Abbildung 6.3 wird für die beiden zufälligen Anfangsmagnetisierungen aus Experiment 1 die Auslenkung der Magnetisierung in Z-Richtung gegenüber dem Durchmesser dargestellt.

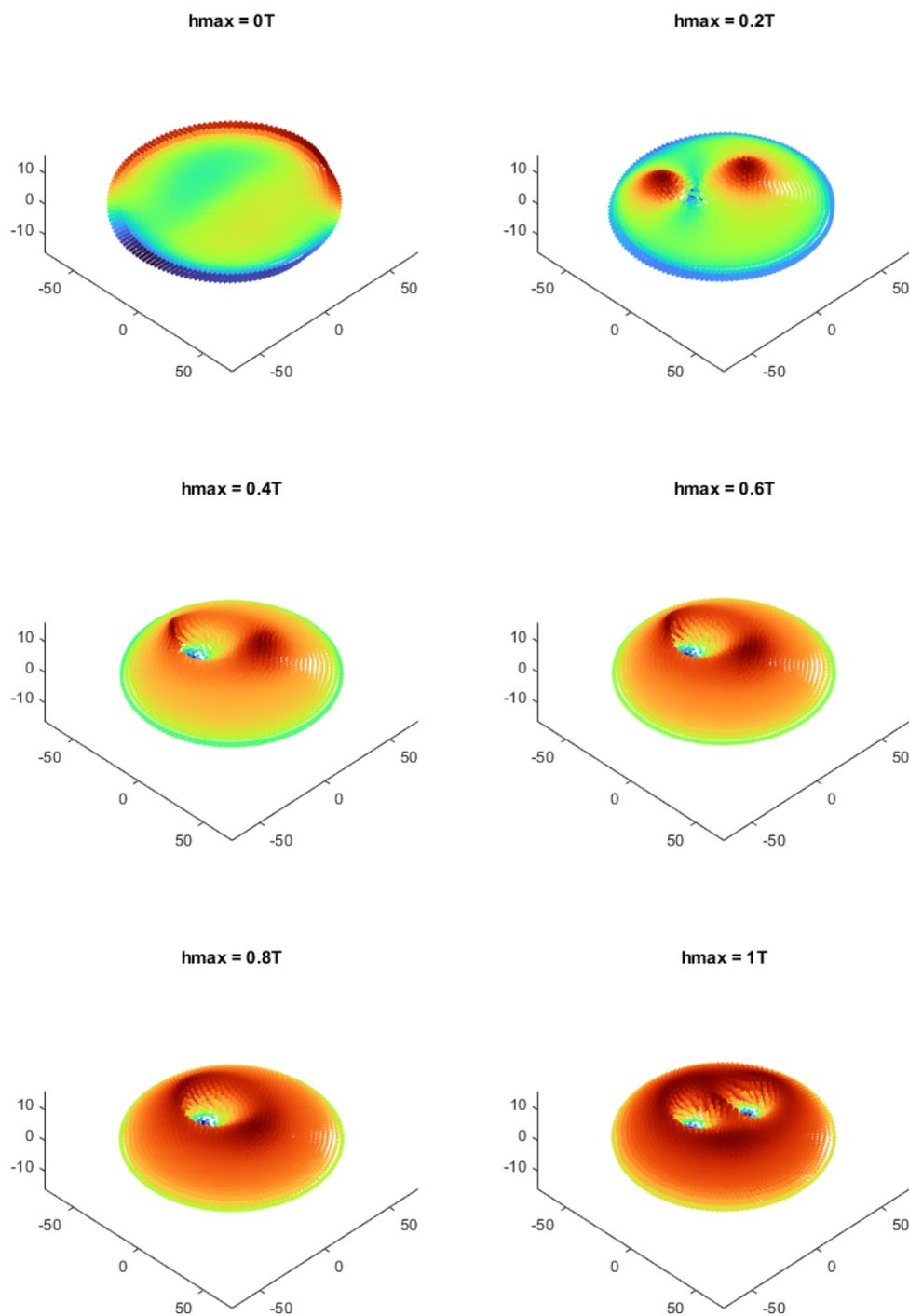


Abbildung 6.5: Die Zustände der 120nm Durchmesser Scheibe für die erste zufällige Anfangsmagnetisierung nach einer Nanosekunde.

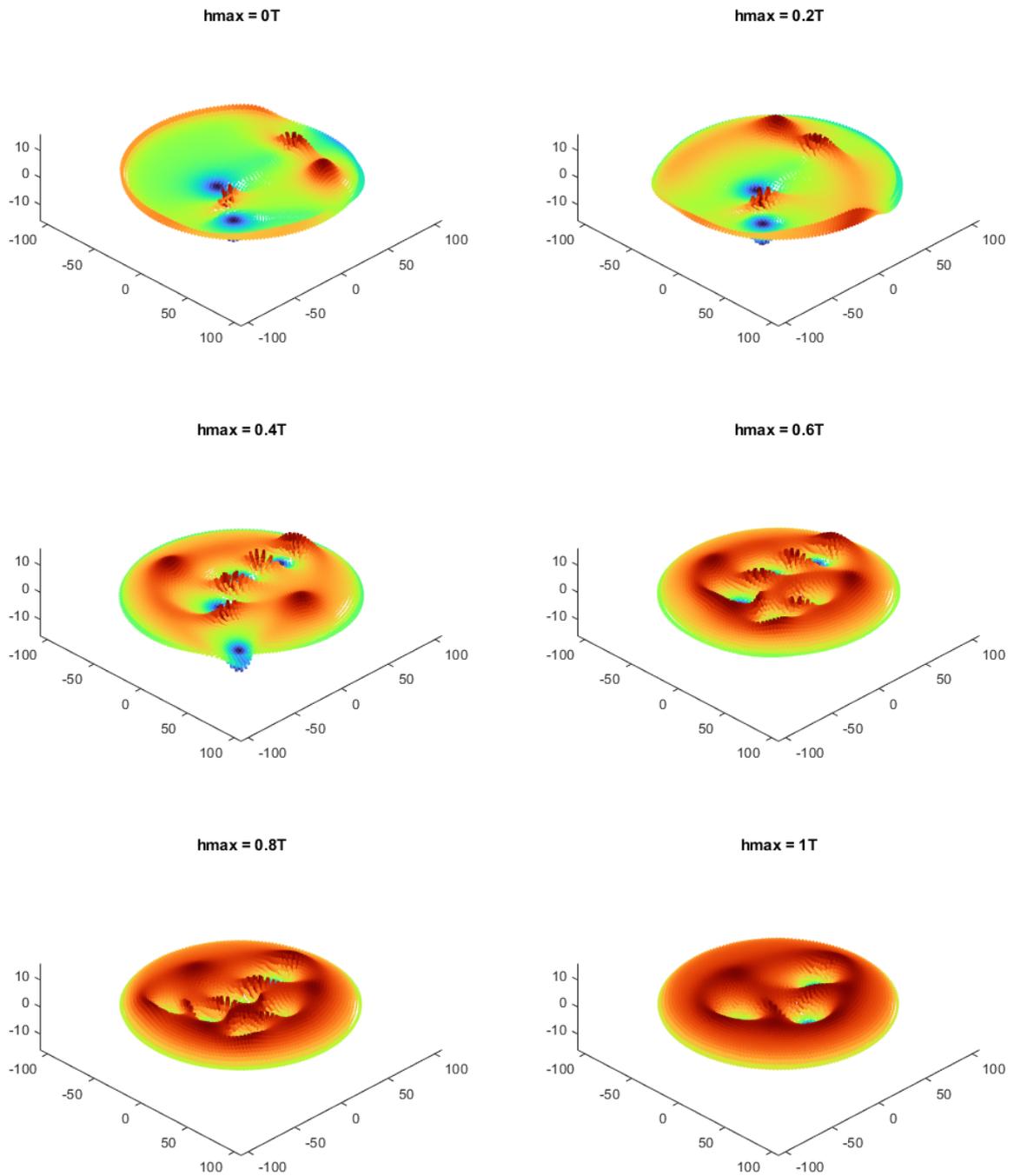


Abbildung 6.6: Die Zustände der 180nm Durchmesser Scheibe für die zweite zufällige Anfangsmagnetisierung nach einer Nanosekunde.

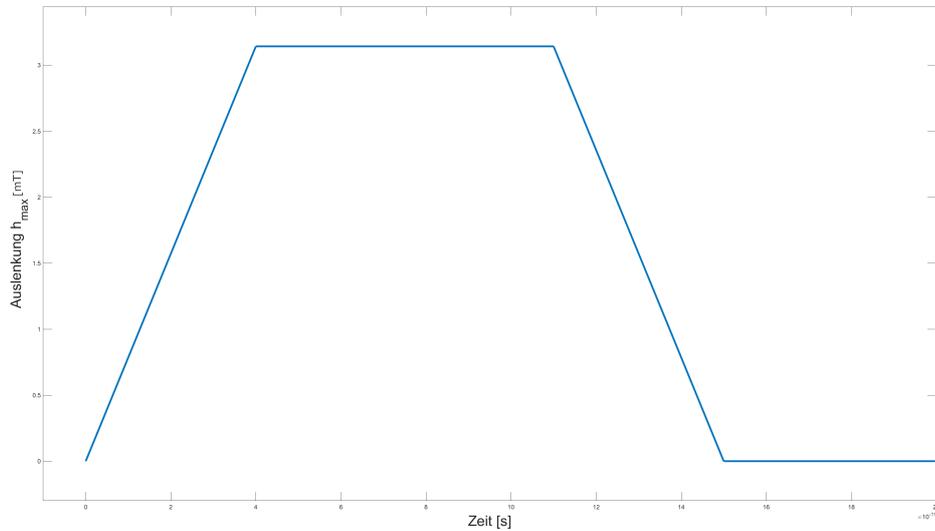


Abbildung 6.7: Funktion f des externen Feldes in X-Richtung wirkend auf die Scheibe im Experiment von Abschnitt 6.2.

6.2 Experiment 2

In Experiment 2 werden die Auswirkungen eines kurz einwirkenden magnetischen Feldes auf einen vollständigen Skyrmion mit unterschiedlicher Feldstärke untersucht.

6.2.1 Aufbau

Das zweite Experiment ist angelehnt an [8], wo, von einem vollständigen Skyrmion als Anfangsmagnetisierung ausgehend, verschiedene externe Felder für kurze Zeit an eine Scheibe mit Durchmesser $d = 140\text{nm}$ angelegt werden. Die Materialparameter entsprechen denen aus Experiment 1, allerdings wird der Gilbert-Dämpfungsparameter α auf 0.002 gesetzt, um das Schwingen des Skyrmions besser beobachten zu können. Als Anfangsmagnetisierung wird der Endzustand des Experiments 1 für eine Scheibe von 140nm Durchmesser und einem externen Feld von 0T verwendet. Anschließend wird ein kurzes externes Feld in Richtung der X-Achse, also $[H_{ext}(t), 0, 0]$ angelegt, wobei $H_{ext}(t)$ eine zeitabhängige Trapezfunktion f ist wie in Abbildung 6.7 ersichtlich. Die Trapezfunktion f und damit das auf die Scheibe wirkende externe Feld wird mit unterschiedlichen Stärken angesetzt. Verwendet wird $\mu_0 \max f(t) = 1, 2, 5, 10, 20, 50, 100, 200\text{mT}$. Die Simulationen laufen für 100.000 äquidistante Zeitschritte zwischen 0 und 10ns. Im Gegensatz zu Experiment 1 wird auch Anisotropie simuliert, dabei ist die Anisotropiekonstante $K = 500\text{J}/\text{m}^3$. Der Maximalabstand zwischen zwei Knoten ist derselbe, wie bei Experiment 1.

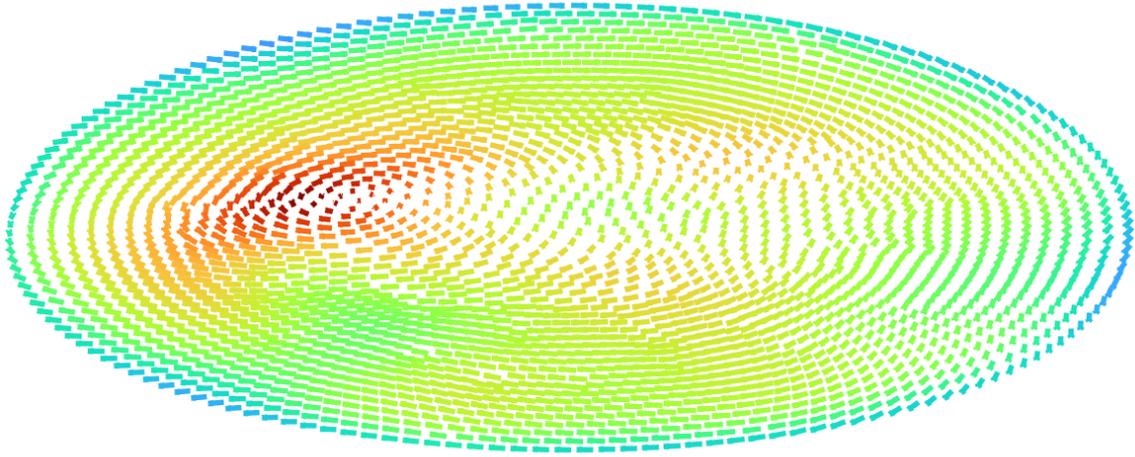


Abbildung 6.8: Auslenkung des instabilen Skyrmions des Versuchs mit $h_{max} = 200\text{mT}$ bei $T = 6\text{ns}$ aus dem Experiment in Abschnitt 6.2.

6.2.2 Resultate

Um das Verhalten des Skyrmions unter dem Einfluss des externen Feldes zu betrachten sind in Abbildung 6.9 die Summe der Einträge in der Y-Richtung zu sehen. Dort sind die beiden Verhaltensweisen zu erkennen, welche sich ausbilden. Zuerst ist abhängig von der Stärke des einwirkenden Feldes eine kurze oszillierende Bewegung zu erkennen, diese führt ab einer Feldstärke von 50mT sogar zu einem Zusammenbruch des vollständigen Skyrmions zu einem unvollständigen. Die zweite Beobachtung ist eine sinusförmige Bewegung der Summe in der Y-Komponente. Diese ist dadurch zu erklären, dass das Zentrum des Skyrmions außerhalb der Scheibenmitte gezwungen wird und diese langsam umkreist wie in Abbildung 6.8 zu erkennen ist. Aus dem Plot nicht leicht zu lesen ist, dass auch diese Auslenkung langsam abnimmt, während das instabile Skyrmion zurück in die Mitte der Scheibe kreiselt.

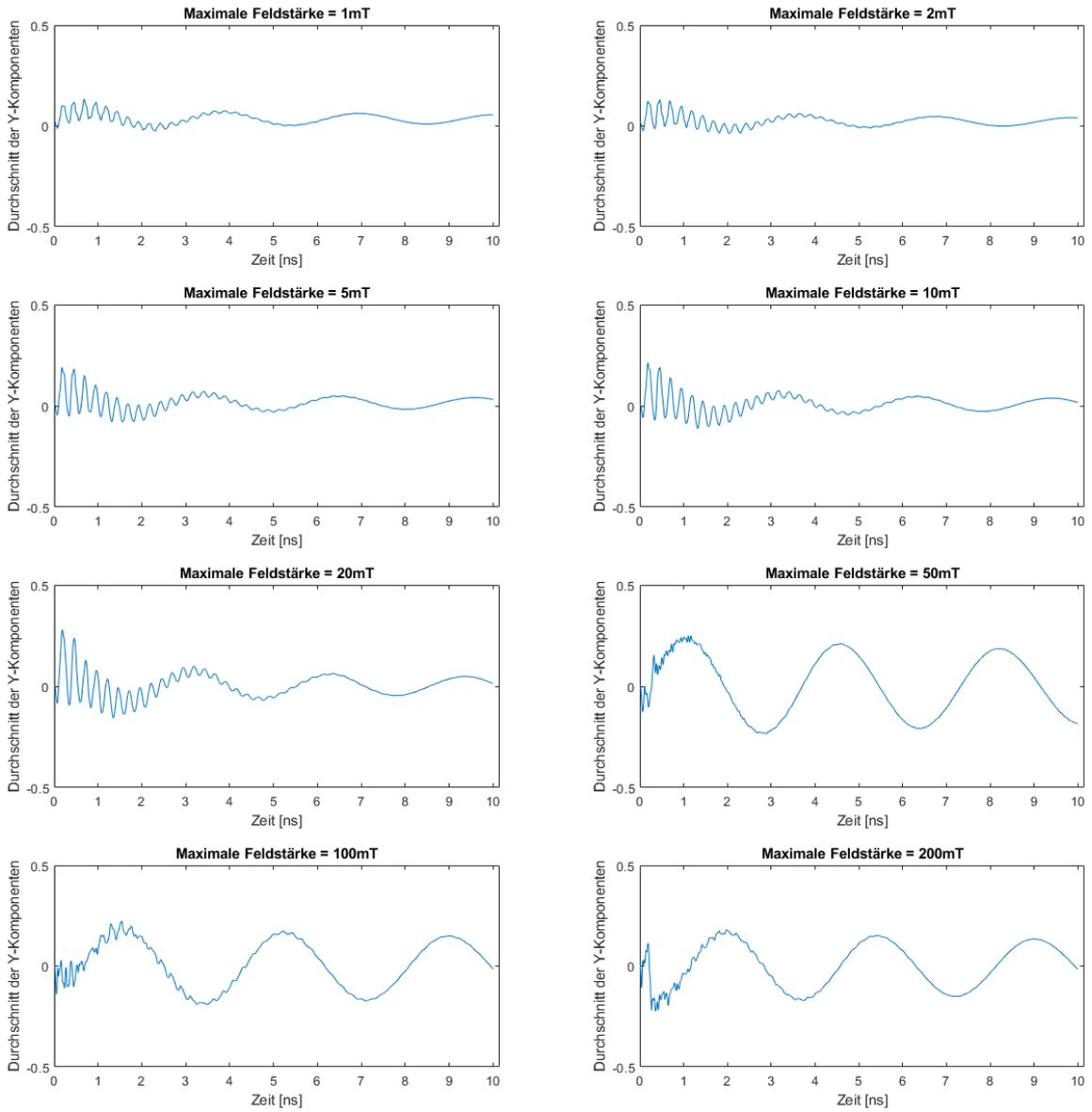


Abbildung 6.9: Die durchschnittliche Auslenkung der zweiten Komponente über den Verlauf den Experiments aus Abschnitt 6.2 für die verschiedenen maximalen Feldstärken.

Literaturverzeichnis

- [1] S. Funken, D. Praetorius und P. Wissgott. *Efficient Implementation of Adaptive P1-FEM in Matlab*. *Computational Methods in Applied Mathematics* 11 (2011), 460–490.
- [2] E. Davoli, G. Di Fratta, D. Praetorius, M. Ruggeri. *Micromagnetics of thin films in the presence of Dzyaloshinskii-Moriya interaction*. *ASC Report No. 28/2020, TU Wien, Institut für Analysis und Scientific Computing*.
- [3] M. Ruggeri. *Coupling and numerical integration of the Landau-Lifshitz-Gilbert equation*. *Dissertation, TU Wien, Institut für Analysis und Scientific Computing* 2016.
- [4] F. Alouges und A. Soyeur. *On global weak solutions for Landau-Lifshitz equations: Existence and nonuniqueness*. *Nonlinear Analysis: Theory, Methods & Applications* 18 (1992), 1071–1084.
- [5] F. Alouges. *A new finite element scheme for Landau-Lifshitz equations*. *Discrete and Continuous Dynamical Systems - Series S* 1 (2008), 187–196.
- [6] F. Bruckner, M. Feischl, T. Führer, P. Goldenits, M. Page, D. Praetorius, M. Ruggeri, D. Suess. *Multiscale modeling in micromagnetics: Existence of solutions and numerical integration*. *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences* 24 (2014), 2627–2662.
- [7] M. Beg, R. Carey, W. Wang, et al. *Ground state search, hysteretic behaviour and reversal mechanism of skyrmionic textures in confined helimagnetic nanostructures*. *Scientific Reports* 5 (2015), 17137.
- [8] G. Hrkac, C. Pfeiler, D. Praetorius, M. Ruggeri, A. Segatti, B. Stiftner. *Convergent tangent plane integrators for the simulation of chiral magnetic skyrmion dynamics*. *Advances in Computational Mathematics* 45 (2019), 1329–1368.