

# Kurzfassung

Diese Arbeit widmet sich der effizienten numerischen Lösung von gewöhnlichen Differentialgleichungen (GDG), welche hochoszillatorische Lösungen aufweisen. Das Modell, welches hier von Interesse ist, ist die eindimensionale stationäre (d.h. zeitunabhängige) Schrödingergleichung im hochoszillatorischen Bereich. Standard Verfahren für GDG zur Lösung dieser Gleichung sind sehr ineffizient, da sie sehr kleine Gittergrößen verwenden müssen, um die schnellen Oszillationen genau aufzulösen. Anstelle dessen entwickeln und analysieren wir hier numerische Verfahren, welche, aufbauend auf WKB-Theorie (benannt nach den Physikern Wentzel, Kramers und Brillouin), auf a priori Informationen über das asymptotische Verhalten der Lösung basieren.

Die Arbeit ist in drei Teile gegliedert, wobei in jedem eine neue WKB-basierte numerische Methode zur Lösung der hochoszillatorischen Schrödingergleichung präsentiert wird.

Im ersten Teil dieser Arbeit erweitern wir ein bereits existierendes WKB-basiertes Einschrittverfahren zweiter Ordnung um eine adaptive Schrittweitensteuerung und einen automatischen Mechanismus zum Wechseln numerischer Methoden. Diese Erweiterung erlaubt es dem Algorithmus, zwischen der WKB-basierten Methode für oszillatorische Bereiche und einem Runge-Kutta-Verfahren für glattere (d.h. weniger oszillatorische) Bereiche zu wechseln, was insgesamt zu einer Effizienzsteigerung führt. Durch den Vergleich mit einer ähnlichen Strategie aus der Literatur zeigen wir, dass unser neuer Ansatz bezüglich der Genauigkeit und Effizienz überlegen ist.

Im zweiten Teil entwickeln wir eine Erweiterung (mit höherer Ordnung) des WKB-basierten Einschrittverfahrens, welches im ersten Teil dieser Arbeit verwendet wurde. Das Verfahren beruht auf einer WKB-basierten Transformation der Schrödingergleichung in eine weniger oszillatorische Gleichung, welche numerisch auf einem groben Gitter gelöst werden kann. Durch die Herleitung hinreichend genauer Quadraturformeln für mehrere oszillatorische Integrale, welche in der Picard-Iteration der Lösung des transformierten Problems auftreten, erhalten wir ein Einschrittverfahren dritter Ordnung in Bezug auf die Schrittweite. Die Genauigkeit und Effizienz des neuen Verfahrens werden anhand mehrerer numerischer Beispiele demonstriert.

Im letzten Teil dieser Arbeit implementieren wir direkt eine WKB-Approximation beliebiger Ordnung als Näherungslösung für die Schrödingergleichung. Unsere Fehleranalyse stützt sich hauptsächlich auf die Annahme, dass der Koeffizient in der Gleichung analytisch ist. Wir leiten Fehlerabschätzungen her, welche explizit bezüglich des kleinen Parameters in der GDG sowie der gewählten Trunkierungsordnung für die zugrunde liegende asymptotische WKB-Reihe ist. Diese WKB-Reihe wird insbesondere im Hinblick auf die optimale Anzahl von Termen analysiert, um den resultierenden Approximationsfehler zu minimieren. Unsere Untersuchung zeigt, dass die optimale Anzahl an Termen umgekehrt proportional zum in der GDG auftretenden kleinen Parameter ist, was einen zugehörigen minimalen Fehler liefert, welcher exponentiell klein in Bezug auf diesen Parameter ist.

# Abstract

This thesis is dedicated to the efficient numerical treatment of ordinary differential equations (ODEs) exhibiting highly oscillatory solutions. The model of interest here is the one-dimensional stationary (i.e. time-independent) Schrödinger equation in the highly oscillatory regime. Standard ODE methods become highly inefficient when solving this equation, as they have to use very small grid sizes in order to resolve the rapid oscillations accurately. Instead, we develop and analyze numerical methods which utilize a priori information on the asymptotic behavior of the solution, relying on WKB theory (named after the physicists Wentzel, Kramers and Brillouin).

The thesis is divided into three parts, each corresponding to a novel WKB-based numerical approach for solving the highly oscillatory Schrödinger equation.

In the first part of this thesis, we enhance an existing WKB-based second order one-step method with an adaptive step size controller and an automated methods switching. This extension allows the algorithm to switch between the WKB-based method for oscillatory regions and a standard Runge-Kutta method for smoother (i.e. less oscillatory) regions, leading to an overall increase in efficiency. By comparing with a similar strategy from existing literature, we find that our novel approach outperforms in terms of both accuracy and efficiency.

In the second part, we develop a higher order extension to the WKB-based one-step method employed in the first part of this thesis. The method relies on a WKB-based transformation of the Schrödinger equation into a smoother equation, which can be solved numerically on a coarse grid. By establishing sufficiently accurate quadrature formulas for several oscillatory integrals encountered in the Picard approximation of the solution of this transformed problem, we obtain a one-step method that is third order with respect to the step size. The accuracy and efficiency of the novel method are demonstrated through several numerical examples.

In the final part of this thesis, we implement directly an arbitrary order WKB approximation as an approximate solution to the Schrödinger equation. Our error analysis relies mainly on the assumption that the coefficient in the equation is analytic. We derive error estimates explicitly in terms of the small parameter present in the ODE, as well as of the chosen truncation order for the underlying asymptotic WKB series. This WKB series is then analyzed particularly with regard to the optimal number of terms required to minimize the resulting approximation error. Our investigation reveals that the optimal number of terms is inversely proportional to the small parameter in the ODE, yielding a corresponding minimal error which is exponentially small with respect to this parameter.