

Calcul RK4

- fonction d'onde "psi"
- dérivée "phi"
- incrément "h" de la position
- vecteur d'onde "k"

p1 = phi

Calcul des coefficients pour
déterminer la pente au point x

coeff psi : p1,p2,p3,p4
coeff phi : t1,t2,t3,t4

Potentiel > Énergie ?

Oui

$t1 = +(k^2)*psi$

Non

$t1 = -(k^2)*psi$

p2 = phi
+ht1/2

Potentiel > Énergie ?

Oui

$t2 = +(k^2)*(psi + hp1/2)$

Non

$t2 = -(k^2)*(psi + hp1/2)$

p3 = phi
+ht2/2

Potentiel > Énergie ?

Oui

$t3 = +(k^2)*(psi + hp2/2)$

Non

$t3 = -(k^2)*(psi + hp2/2)$

p4 = phi +ht3

Potentiel > Énergie ?

Oui

$t4 = +(k^2)*(psi + hp3/2)$

Non

$t4 = -(k^2)*(psi + hp3/2)$

On estime la pente
en accordant plus de
poids aux
coefficients calculés
en h/2

Calcul des valeurs
de Psi et Phi au
point x suivant
dans
l'incrément

$$\psi_{n+1} = \psi_n + P$$
$$\phi_{n+1} = \phi_n + T$$

On retourne les
nouvelles valeurs
de Psi et Phi