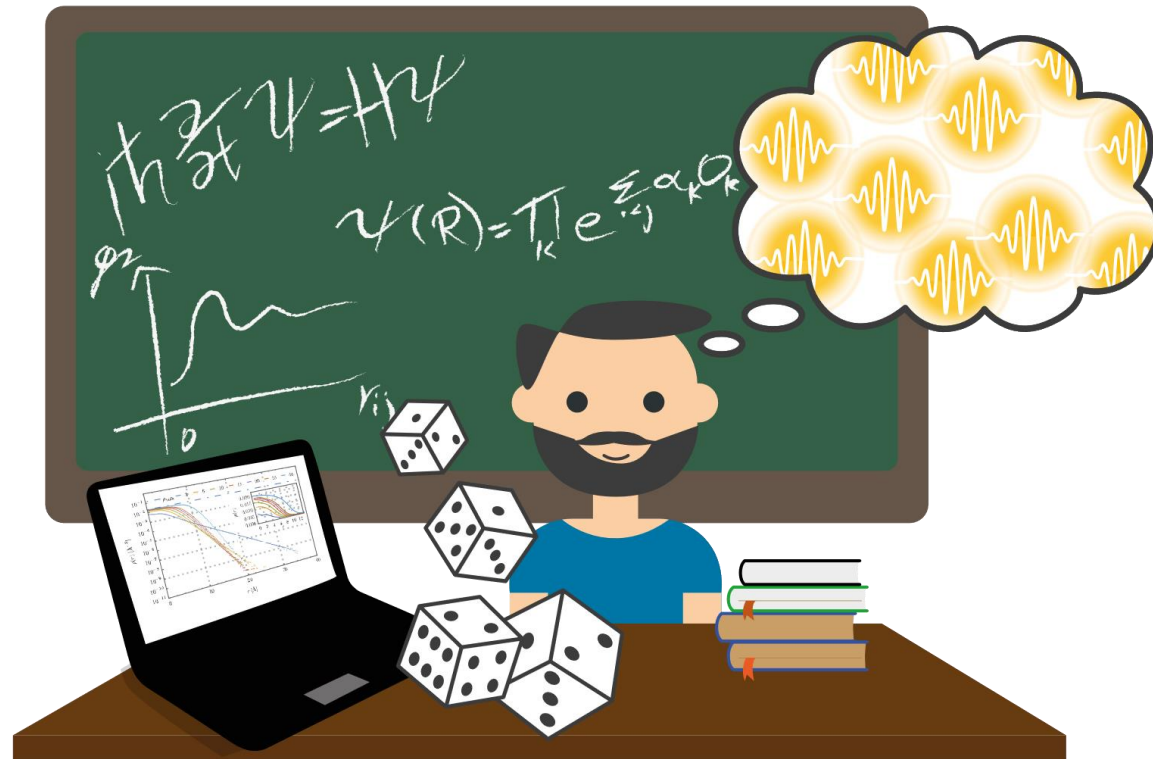


Mit dem Zufall rechnen – Quantenteilchen zähmen leicht gemacht

Mathias Gartner

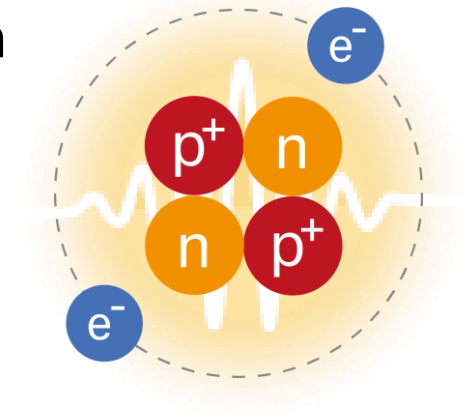


Was sind Quantenteilchen?



Atome (H, He, Na, Cl, Rb, ...)

Helium-Atom



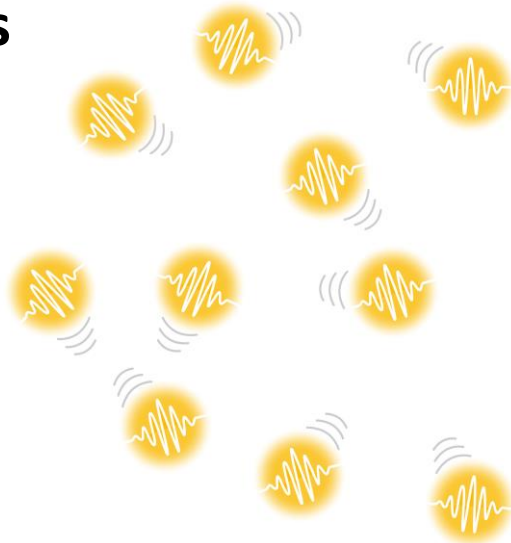
Was sind Quantenteilchen?



gasförmiges
Helium



20°C

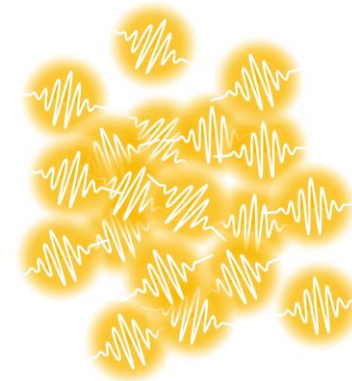


flüssiger
Helium-Tropfen



-269°C

absoluter Nullpunkt -273°C

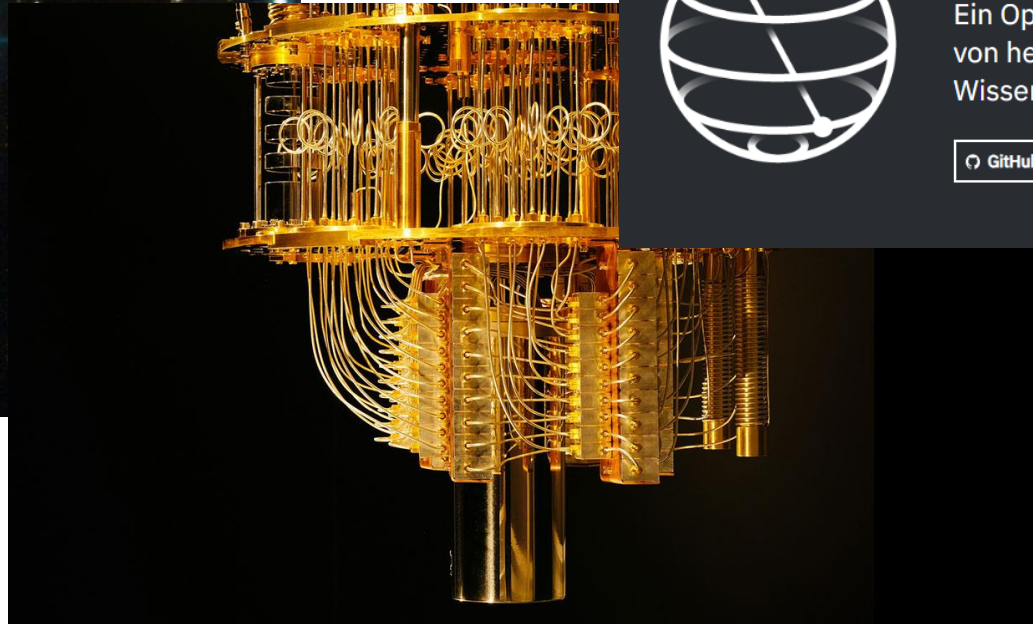
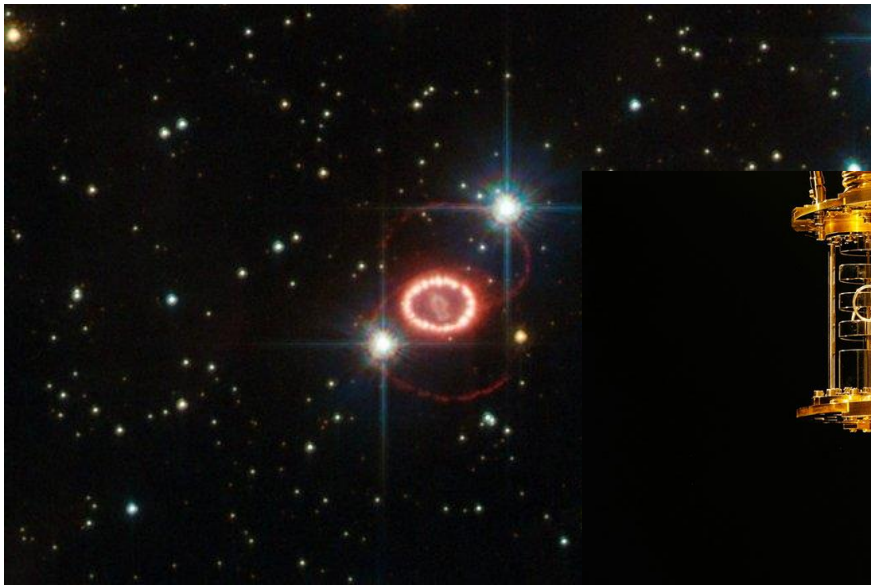


Was passiert,
wenn sich viele Quantenteilchen
gegenseitig beeinflussen?



Antwort ist wichtig für...

Astrophysik - Neutronensterne



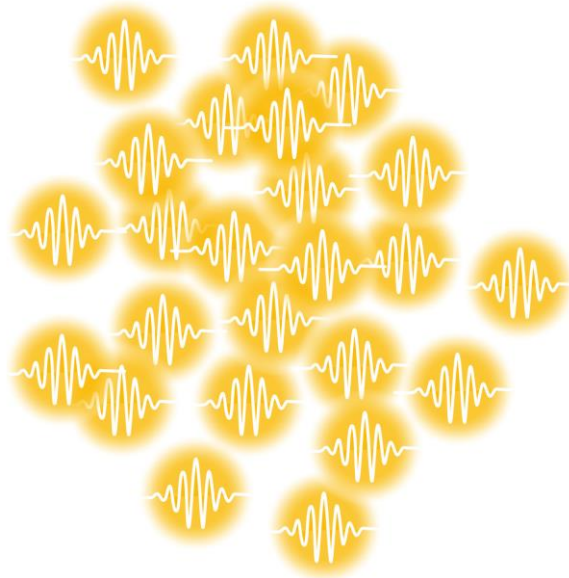
Quantencomputer



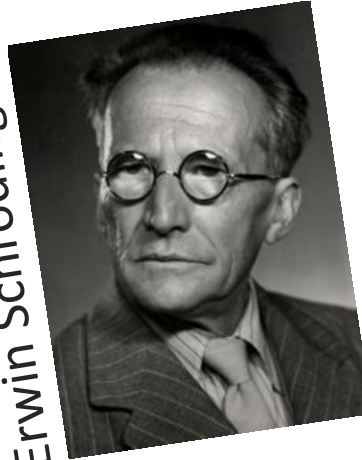
www.qiskit.org

Interessante Eigenschaften

- Größe, Form, Dichte
- kinetische Energie
- potentielle Energie
- Stabilität



Erwin Schrödinger



Schrödinger Gleichung

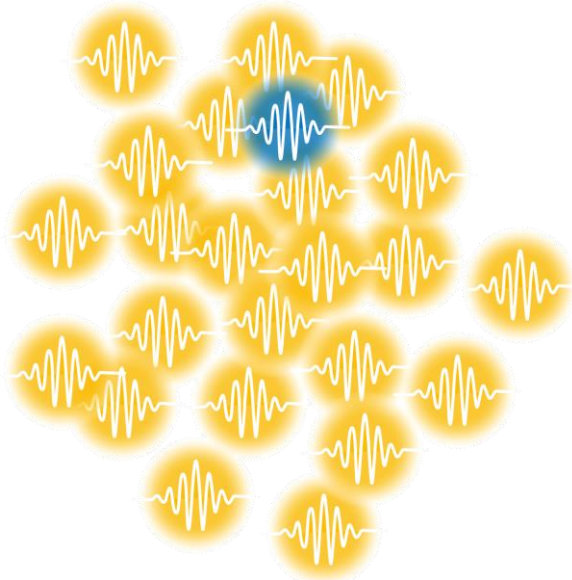


$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) = \hat{H} \psi(\mathbf{r}, t)$$

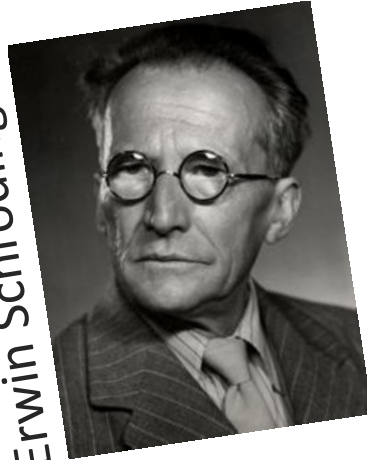
Wellenfunktion

Interessante Eigenschaften

- Größe, Form, Dichte
- kinetische Energie
- potentielle Energie
- Stabilität



Erwin Schrödinger



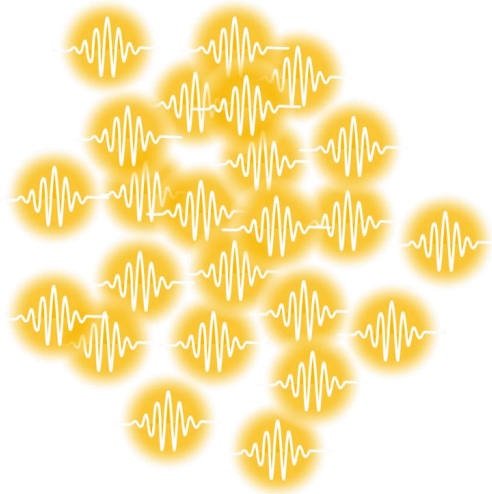
Schrödinger Gleichung



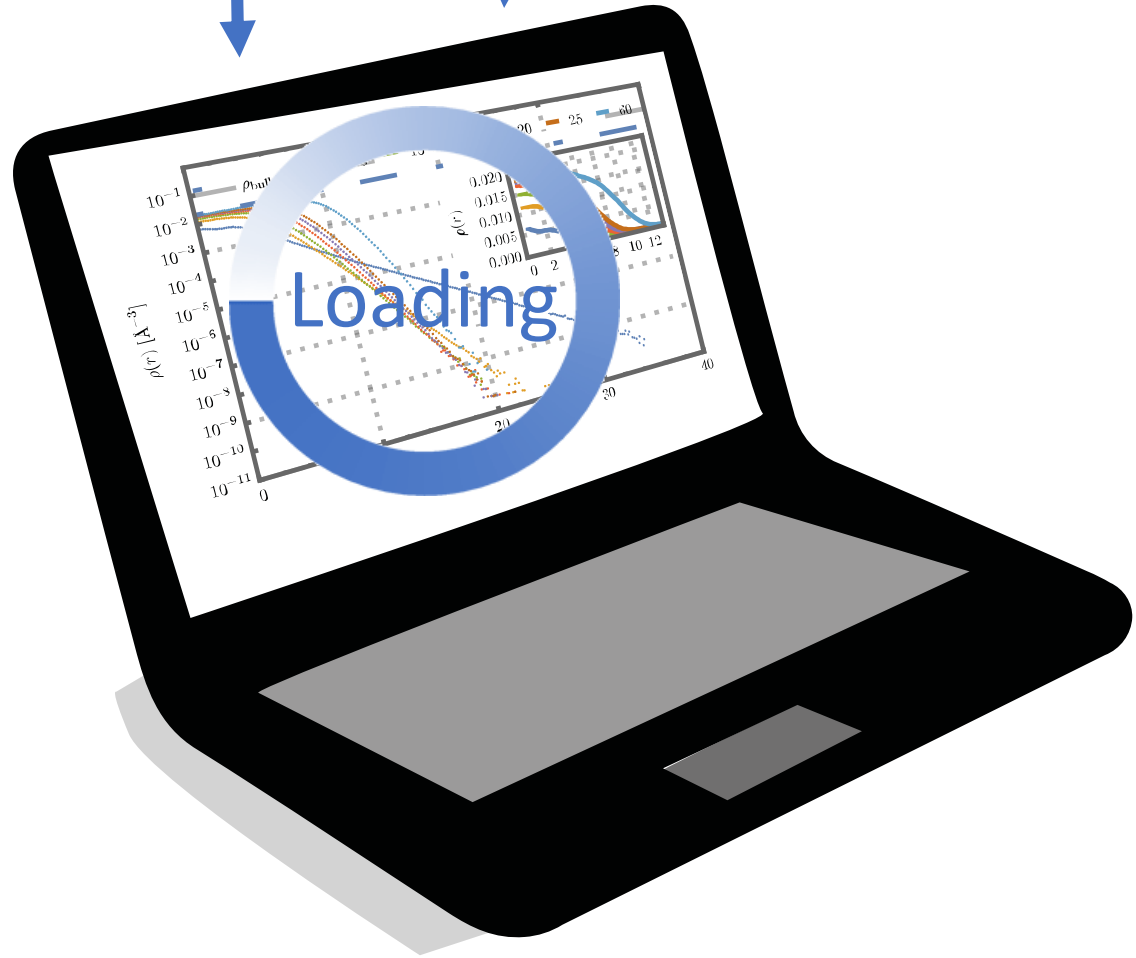
$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) = \hat{H} \psi(\mathbf{r}, t)$$

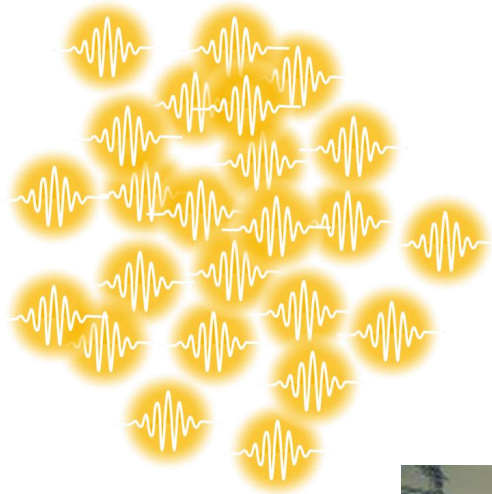
Wellenfunktion

- es gibt unendlich viele verschiedene Anordnungen



$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) = \hat{H} \psi(\mathbf{r}, t)$$





Mach2 – der
Supercomputer
der JKU

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) = \hat{H} \psi(\mathbf{r}, t)$$



1728 Prozessoren
20 TB RAM

Dann verwende ich für die Berechnung
nur **zufällig ausgewählte Anordnungen**



Q: Wo gibt's Experten für den Zufall?

A: Natürlich im Casino von Monte Carlo!



WIKIPEDIA
Die freie Enzyklopädie

- [Hauptseite](#)
- [Themenportale](#)
- [Zufälliger Artikel](#)
- [Mithmachen](#)
- [Artikel verbessern](#)
- [Neuen Artikel anlegen](#)
- [Autorenportal](#)
- [Hilfe](#)
- [Letzte Änderungen](#)
- [Kontakt](#)
- [Spenden](#)

- [Werkzeuge](#)
- [Links auf diese Seite](#)
- [Änderungen an verlinkten Seiten](#)
- [Spezialseiten](#)
- [Permanenter Link](#)
- [Seiteninformationen](#)
- [Wikidata-Dateneintrag](#)

Navigation bar of the Wikipedia page for Monte-Carlo-Simulation, including search and user options.

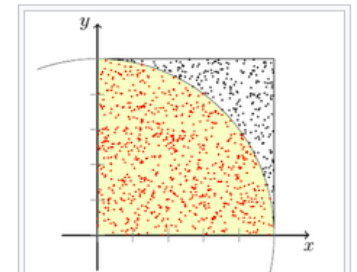
Monte-Carlo-Simulation

Monte-Carlo-Simulation oder **Monte-Carlo-Studie**, auch **MC-Simulation**, ist ein Verfahren aus der **Stochastik**, bei dem eine sehr große Zahl gleichartiger **Zufallsexperimente** die Basis darstellt. Es wird dabei versucht, analytisch nicht oder nur aufwendig lösbare Probleme mit Hilfe der **Wahrscheinlichkeitstheorie** **numerisch** zu lösen. Als Grundlage ist vor allem das **Gesetz der großen Zahlen** zu sehen. Die Zufallsexperimente können entweder – etwa durch Würfeln – real durchgeführt werden oder in Computerberechnungen, bei denen zur **Simulation** von zufälligen Ereignissen mit geeigneten **Algorithmen** scheinbar zufällige Zahlen berechnet werden, die auch als **Pseudozufallszahlen** bezeichnet werden.

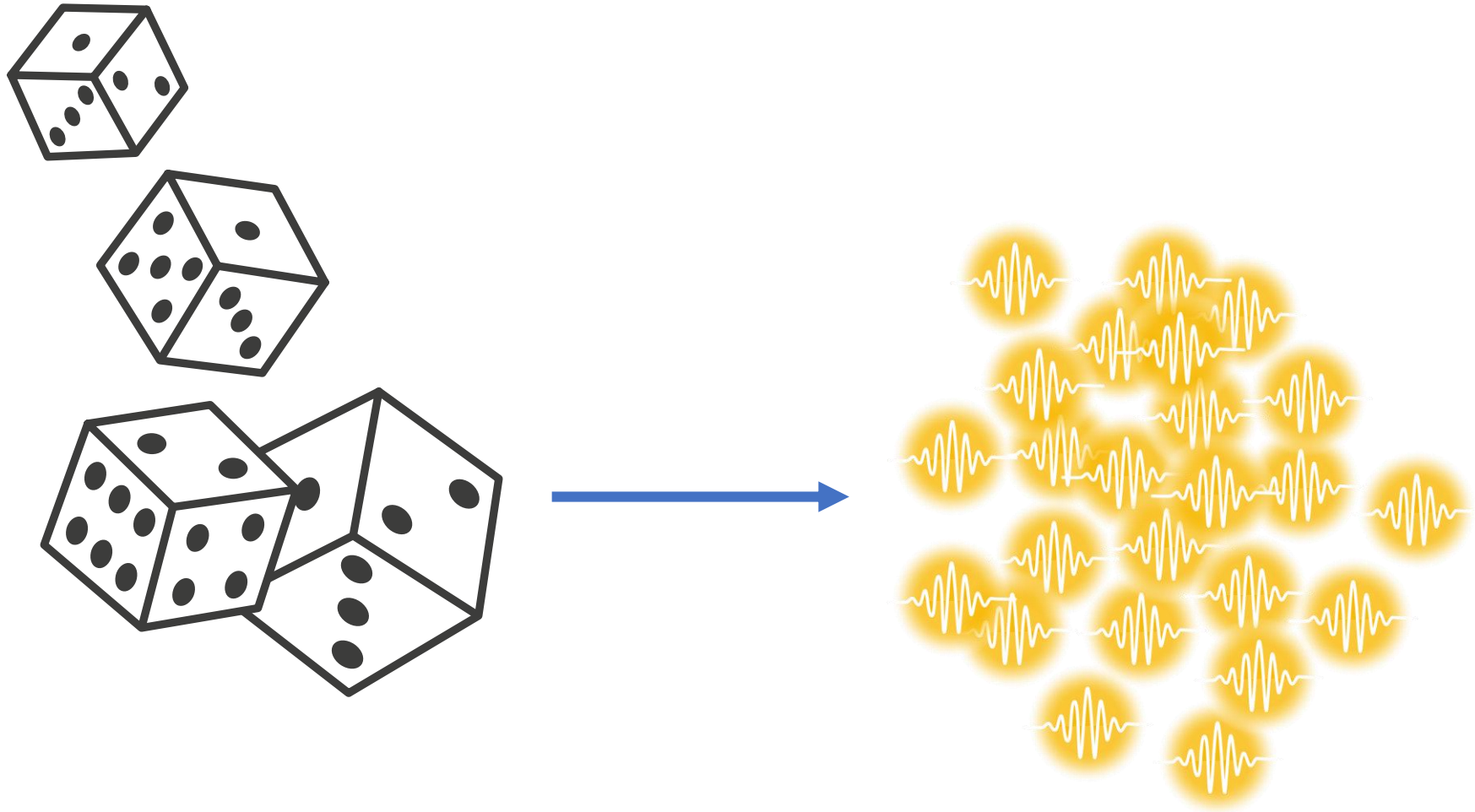
Zu den Pionieren der Monte-Carlo-Methode in den 1940er Jahren gehören **Stanislaw Ulam**, **Nicholas Metropolis** und **John von Neumann**.

Inhaltsverzeichnis [Verbergen]

- 1 **Überblick**
 - 1.1 **Anwendungen und Problemlösungen**
 - 1.2 **Geschichte und Herkunft der Bezeichnung**
- 2 **Mathematik**
- 3 **Methoden**
 - 3.1 **Metropolis-Monte-Carlo**

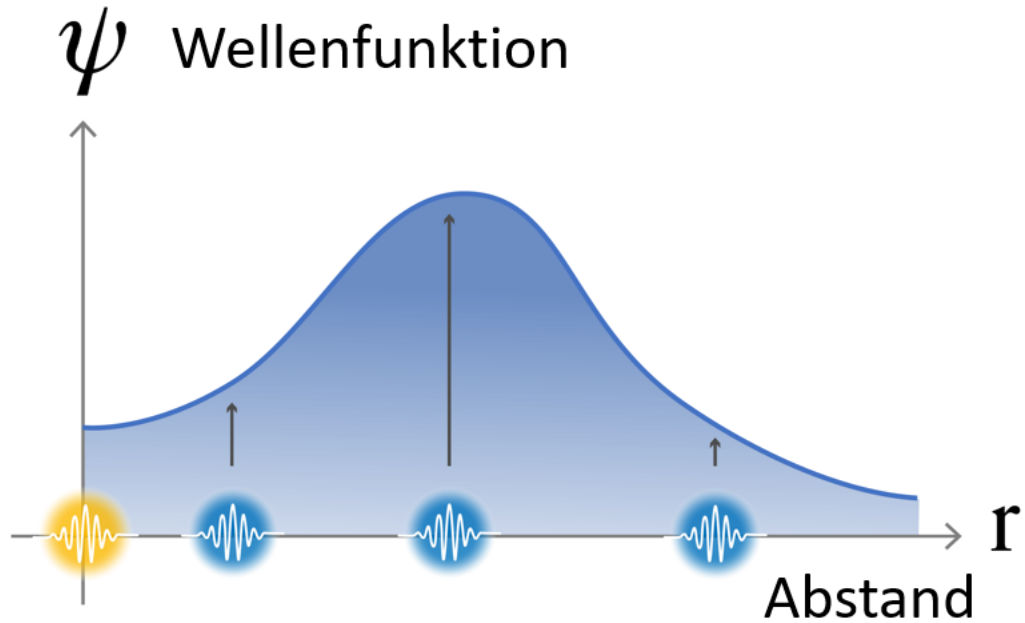


Die Kreiszahl π wird mit der Monte-Carlo-Methode angenähert bestimmt durch das Vierfache der Wahrscheinlichkeit, mit der ein innerhalb des Quadrats zufällig gewählter Punkt in den Kreis fällt. Aufgrund des Gesetzes der großen Zahlen sinkt mit steigender Anzahl von Experimenten die Varianz des Ergebnisses.



Monte-Carlo-Methode

1. Quantenteilchen auswählen
2. in x-Richtung verschieben
3. in y-Richtung verschieben
4. Wellenfunktion berechnen
5. akzeptieren oder ablehnen



Atom Nr.:

- 1
- 2
- 3
- 4
- 5
- 6

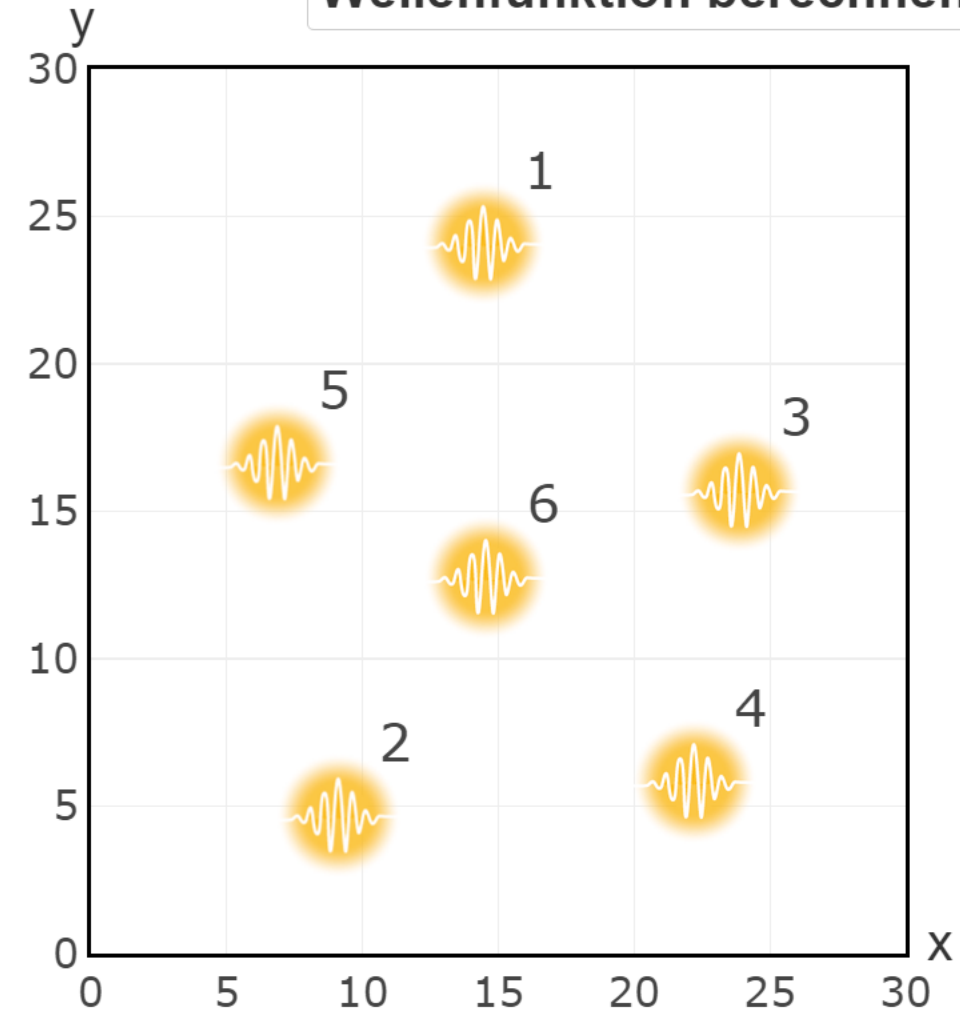
x-Richtung:

- ←3
- ←2
- ←1
- 1→
- 2→
- 3→

y-Richtung:

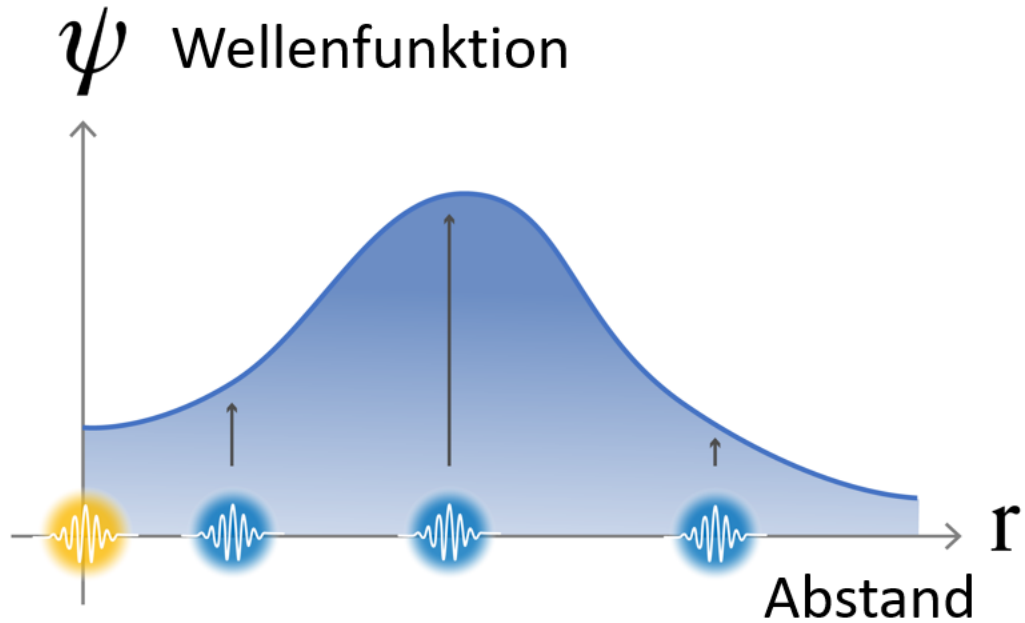
- ↓3
- ↓2
- ↓1
- 1↑
- 2↑
- 3↑

Wellenfunktion berechnen



Monte-Carlo-Methode

1. Quantenteilchen auswählen
2. in x-Richtung verschieben
3. in y-Richtung verschieben
4. Wellenfunktion berechnen
5. akzeptieren oder ablehnen



Atom Nr.:

- 1
- 2
- 3
- 4
- 5
- 6

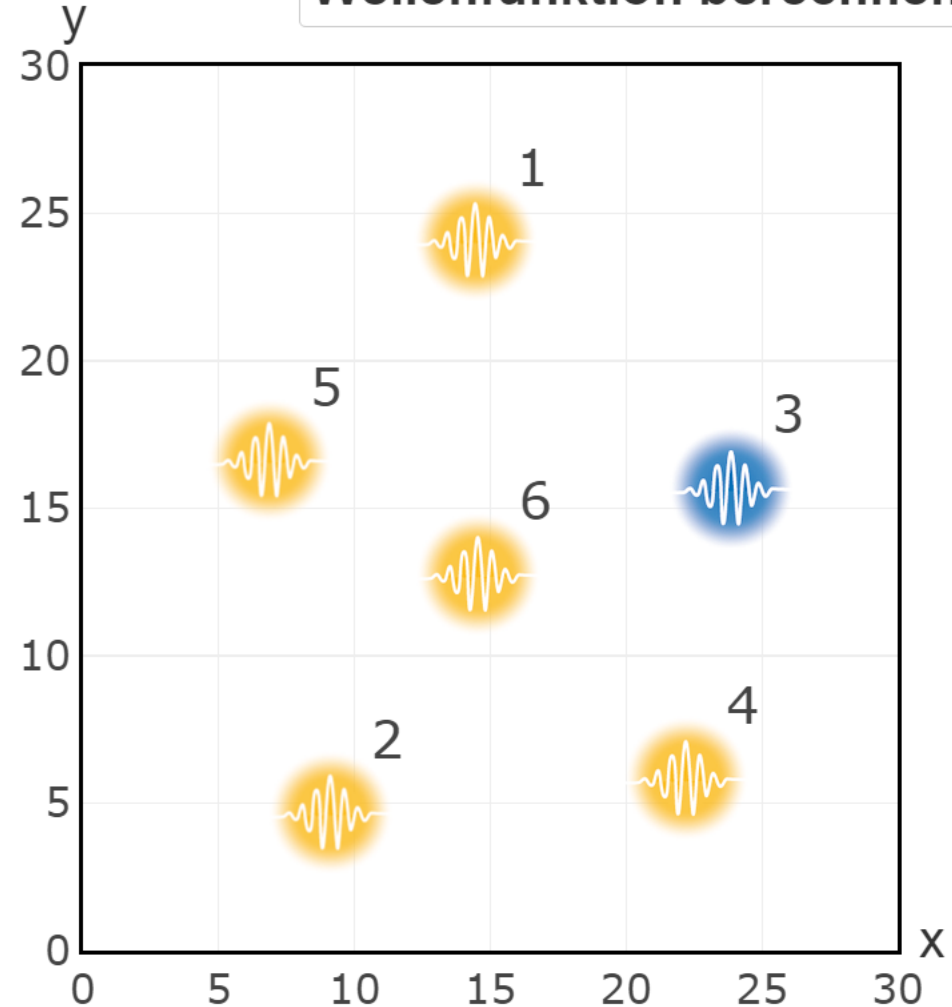
x-Richtung:

- $\leftarrow 3$
- $\leftarrow 2$
- $\leftarrow 1$
- $1 \rightarrow$
- $2 \rightarrow$
- $3 \rightarrow$

y-Richtung:

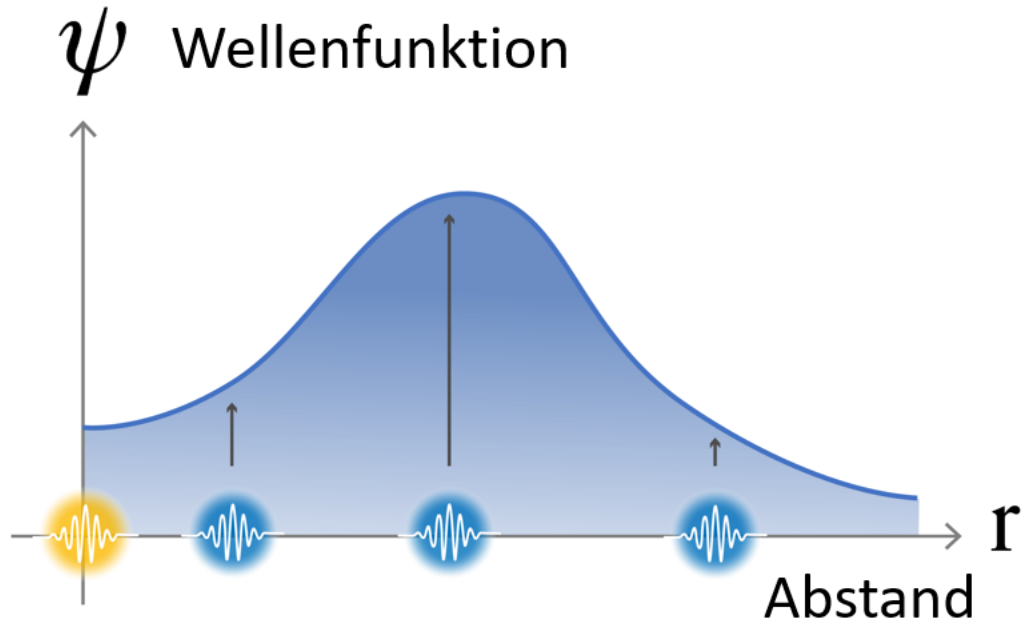
- $\downarrow 3$
- $\downarrow 2$
- $\downarrow 1$
- $1 \uparrow$
- $2 \uparrow$
- $3 \uparrow$

Wellenfunktion berechnen



Monte-Carlo-Methode

1. Quantenteilchen auswählen
2. in x-Richtung verschieben
3. in y-Richtung verschieben
4. Wellenfunktion berechnen
5. akzeptieren oder ablehnen



Atom Nr.:

- 1
- 2
- 3
- 4
- 5
- 6

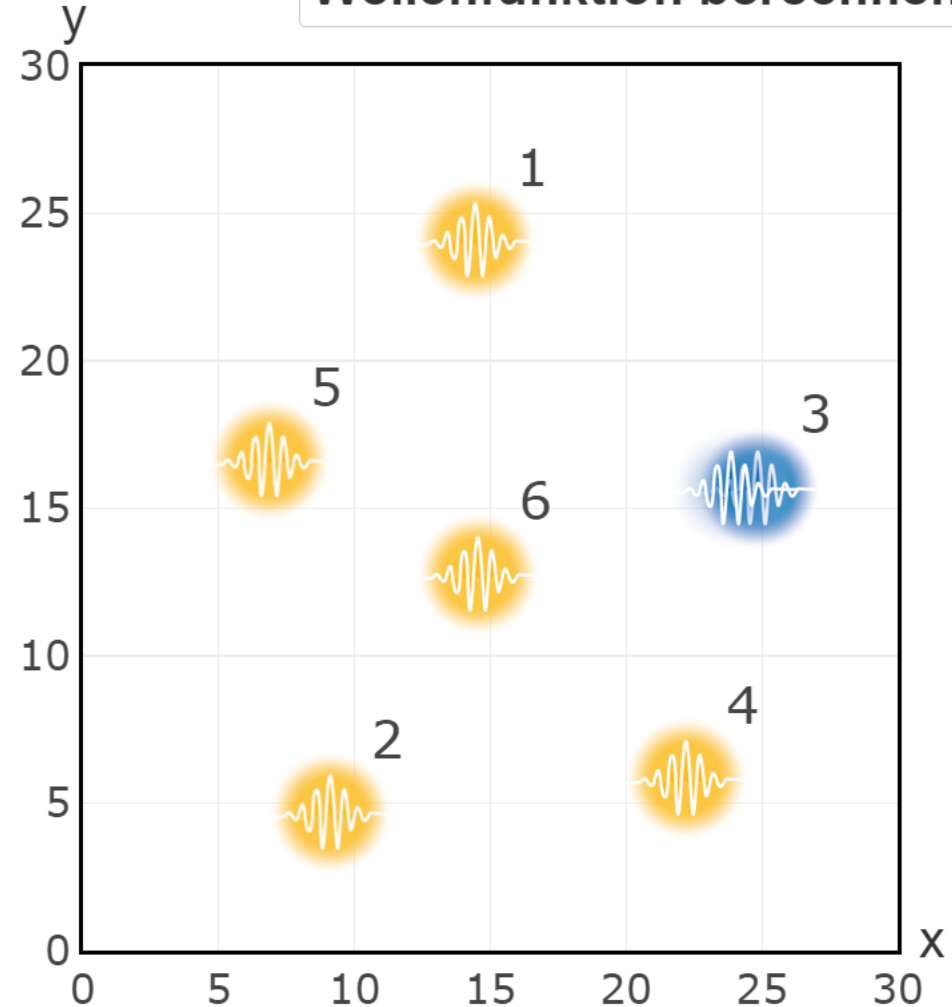
x-Richtung:

- ←3
- ←2
- ←1
- 1→
- 2→
- 3→

y-Richtung:

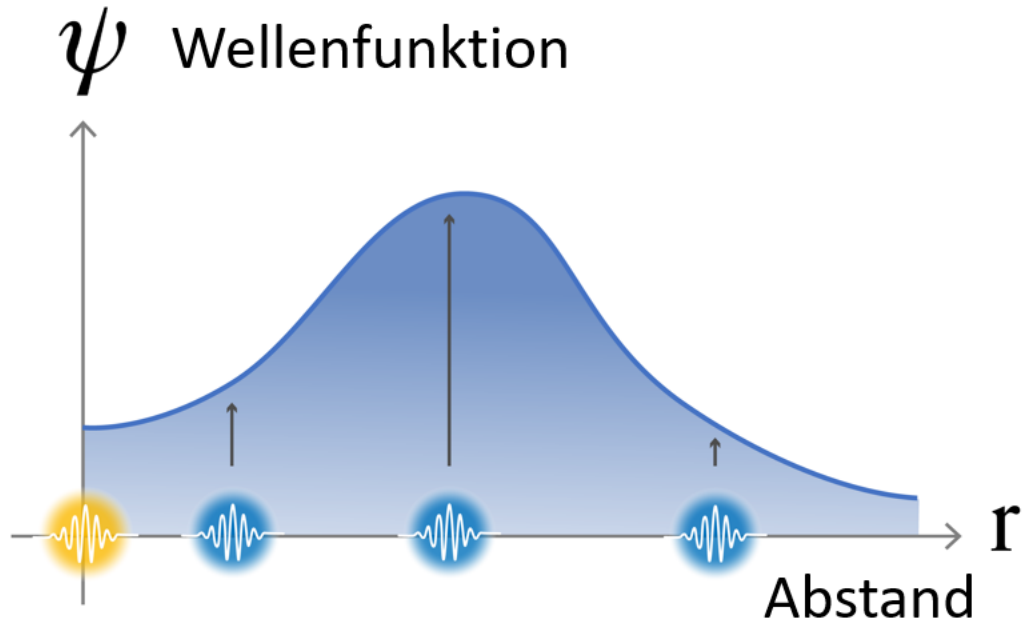
- ↓3
- ↓2
- ↓1
- 1↑
- 2↑
- 3↑

Wellenfunktion berechnen



Monte-Carlo-Methode

1. Quantenteilchen auswählen
2. in x-Richtung verschieben
3. in y-Richtung verschieben
4. Wellenfunktion berechnen
5. akzeptieren oder ablehnen

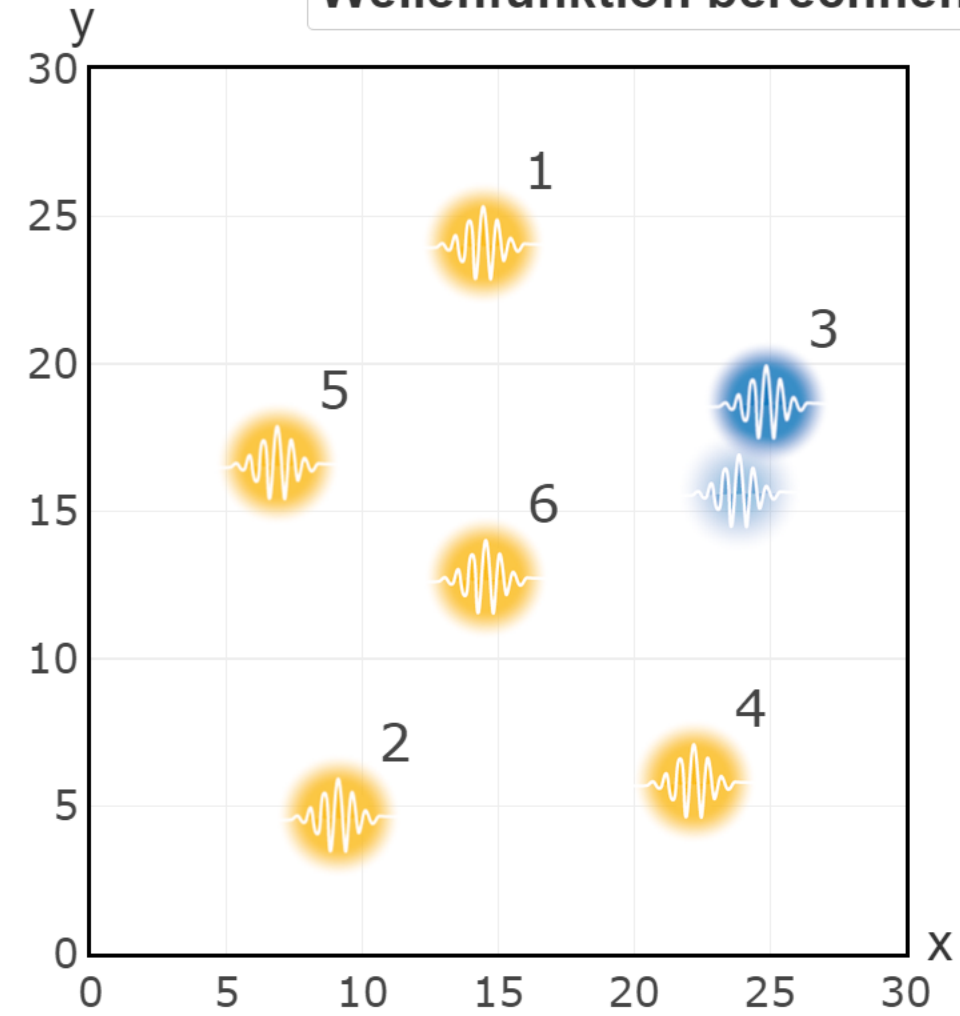


Atom Nr.: 1 2 3 4 5 6

x-Richtung: ←3 ←2 ←1 1→ 2→ 3→

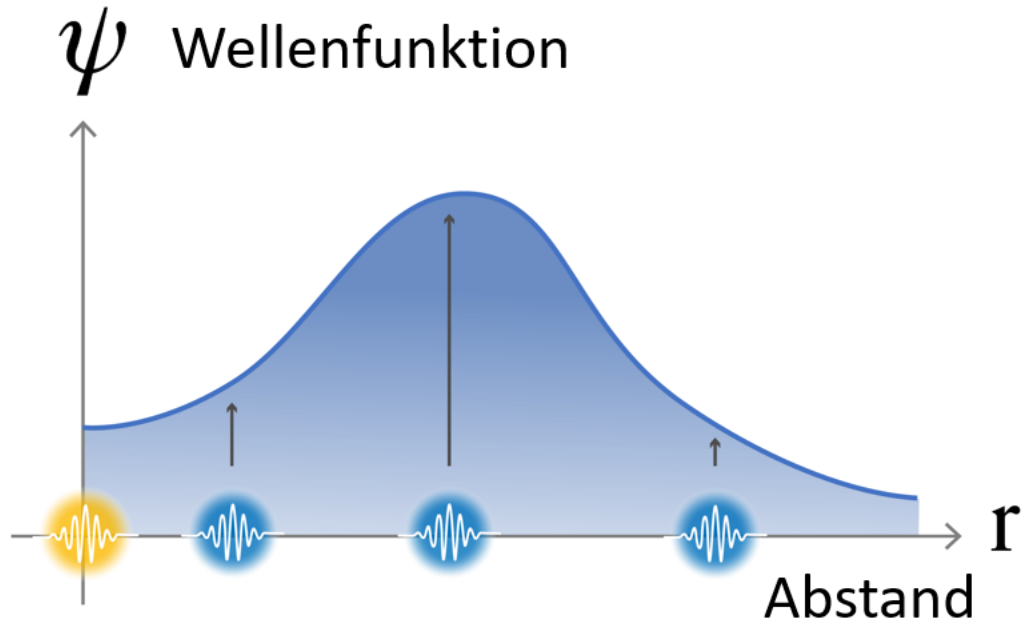
y-Richtung: ↓3 ↓2 ↓1 1↑ 2↑ 3↑

Wellenfunktion berechnen



Monte-Carlo-Methode

1. Quantenteilchen auswählen
2. in x-Richtung verschieben
3. in y-Richtung verschieben
4. Wellenfunktion berechnen
5. akzeptieren oder ablehnen

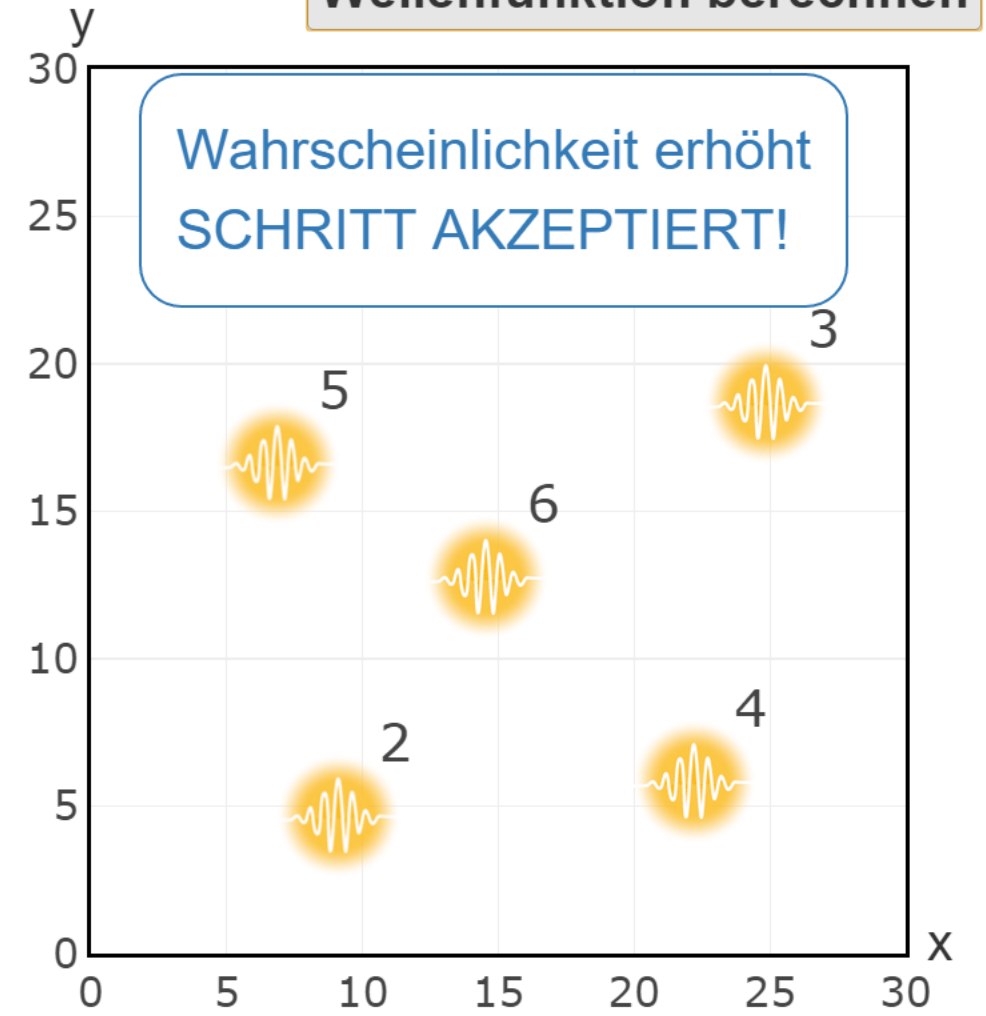


Atom Nr.: 1 2 3 4 5 6

x-Richtung: ←3 ←2 ←1 1→ 2→ 3→

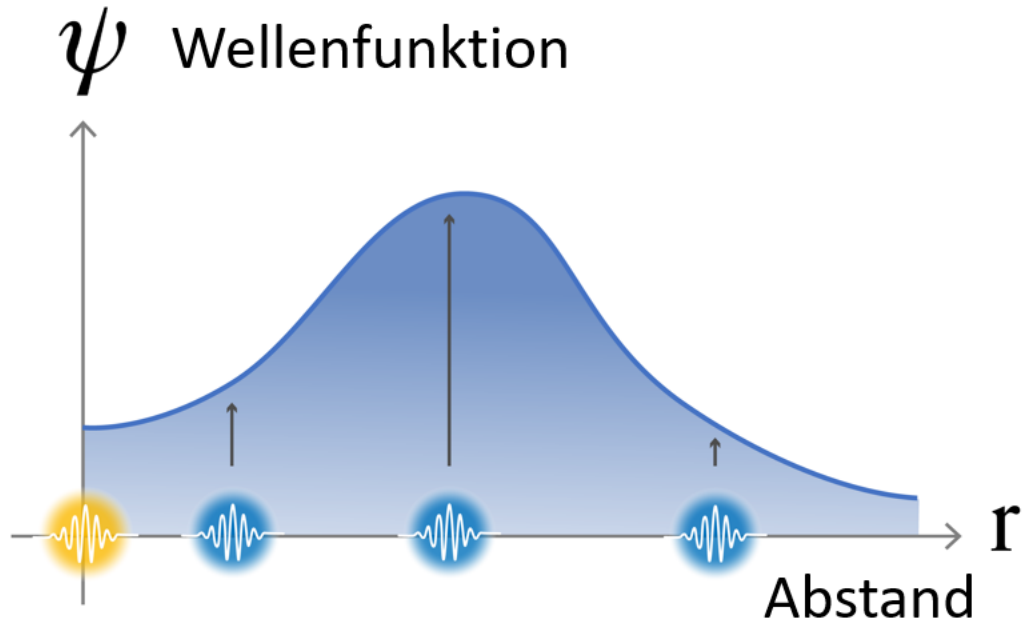
y-Richtung: ↓3 ↓2 ↓1 1↑ 2↑ 3↑

Wellenfunktion berechnen



Monte-Carlo-Methode

1. Quantenteilchen auswählen
2. in x-Richtung verschieben
3. in y-Richtung verschieben
4. Wellenfunktion berechnen
5. akzeptieren oder ablehnen



Atom Nr.:

- 1
- 2
- 3
- 4
- 5
- 6

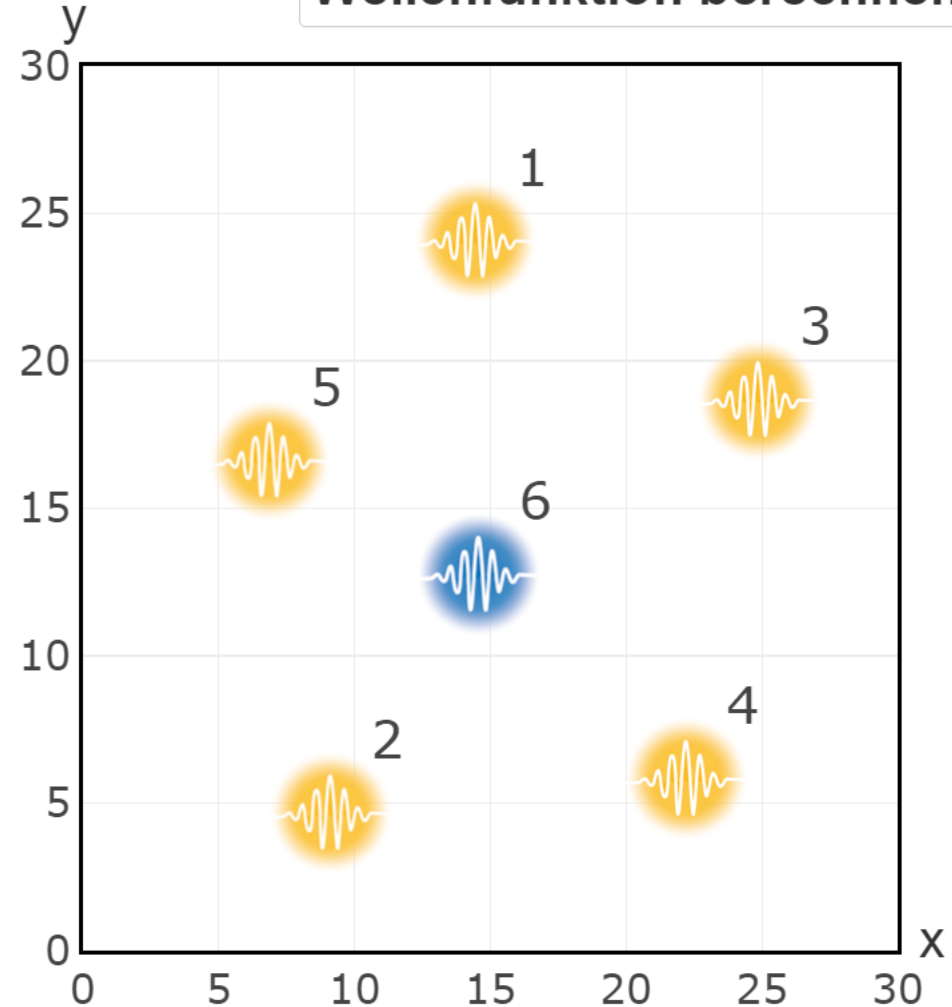
x-Richtung:

- $\leftarrow 3$
- $\leftarrow 2$
- $\leftarrow 1$
- $1 \rightarrow$
- $2 \rightarrow$
- $3 \rightarrow$

y-Richtung:

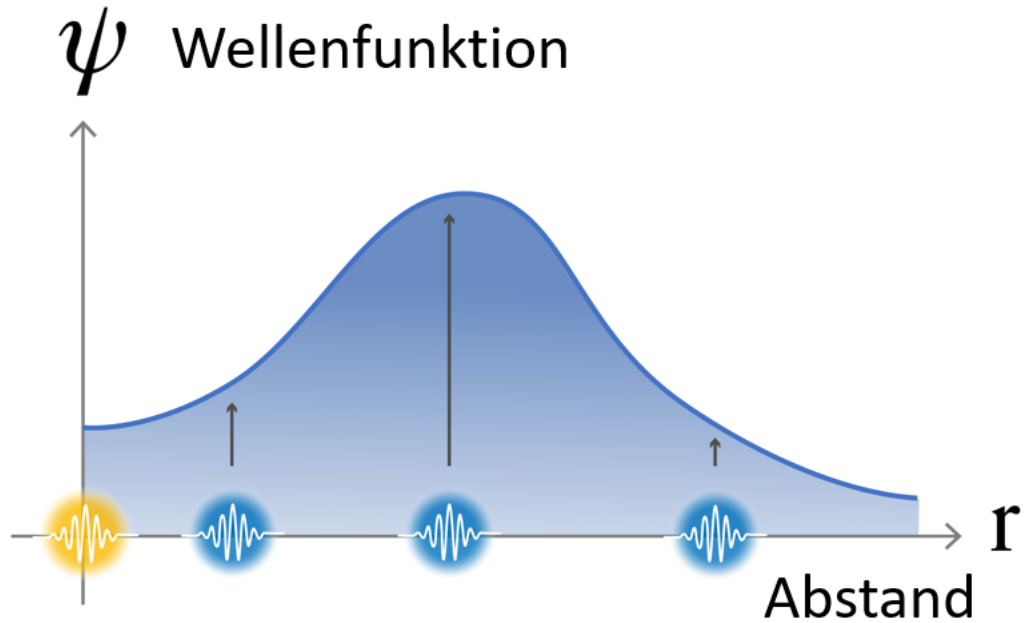
- $\downarrow 3$
- $\downarrow 2$
- $\downarrow 1$
- $1 \uparrow$
- $2 \uparrow$
- $3 \uparrow$

Wellenfunktion berechnen



Monte-Carlo-Methode

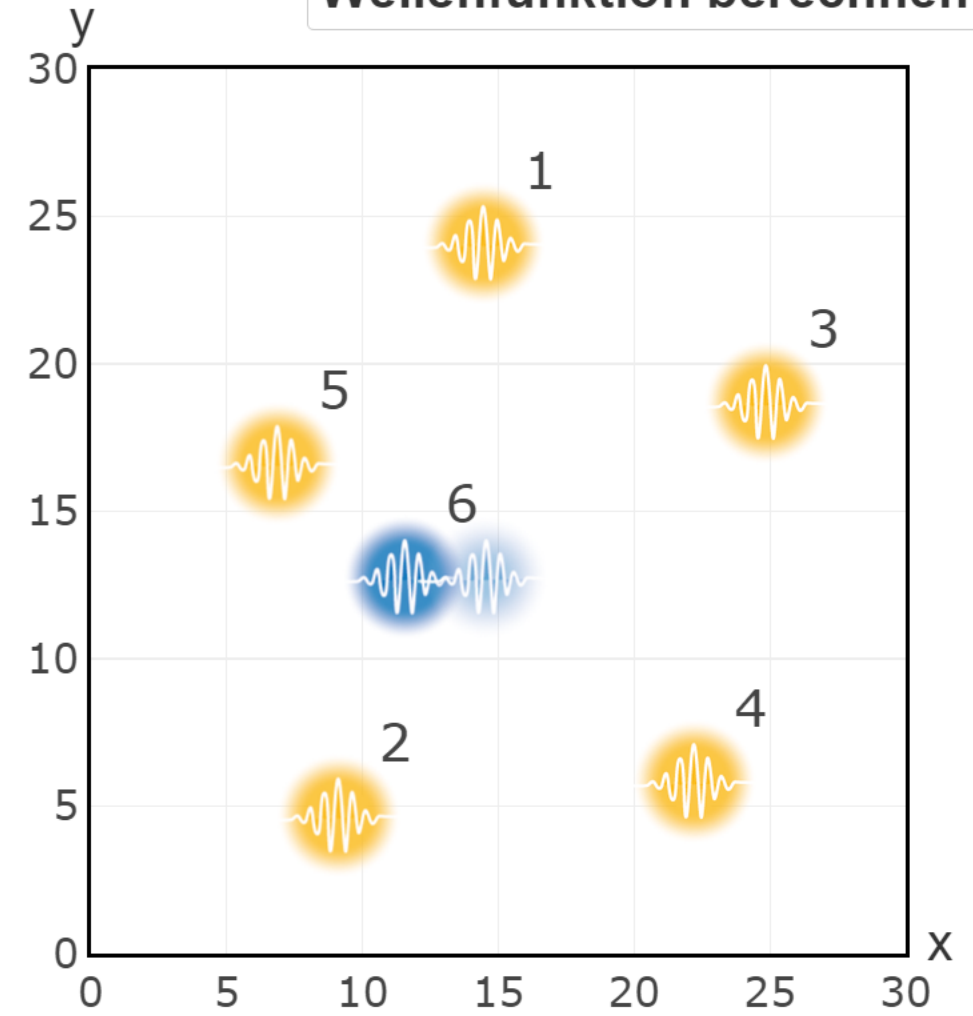
1. Quantenteilchen auswählen
2. in x-Richtung verschieben
3. in y-Richtung verschieben
4. Wellenfunktion berechnen
5. akzeptieren oder ablehnen



Atom Nr.: 1 2 3 4 5 6

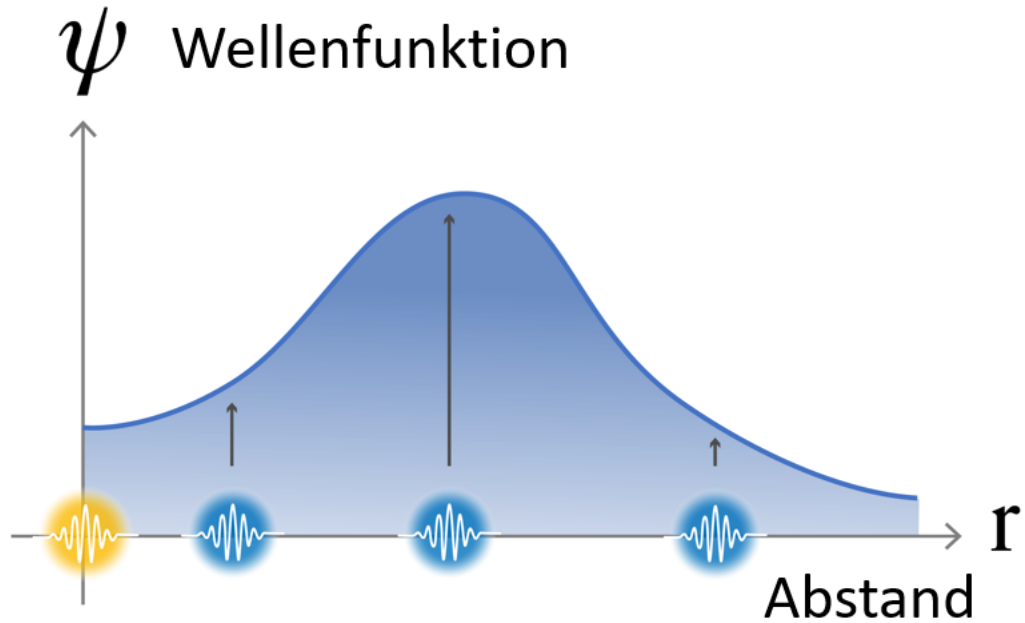
x-Richtung: ←3 ←2 ←1 1→ 2→ 3→

y-Richtung: ↓3 ↓2 ↓1 1↑ 2↑ 3↑



Monte-Carlo-Methode

1. Quantenteilchen auswählen
2. in x-Richtung verschieben
3. in y-Richtung verschieben
4. Wellenfunktion berechnen
5. akzeptieren oder ablehnen

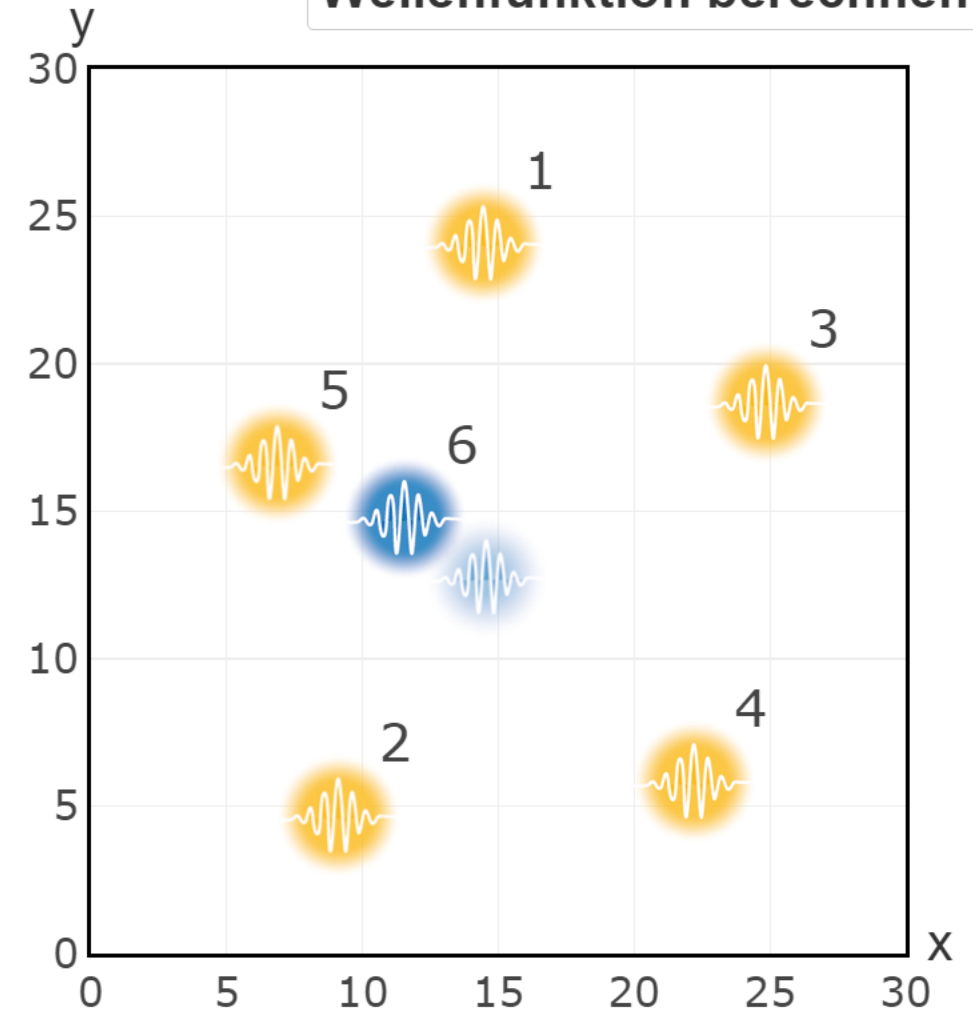


Atom Nr.: 1 2 3 4 5 6

x-Richtung: ←3 ←2 ←1 1→ 2→ 3→

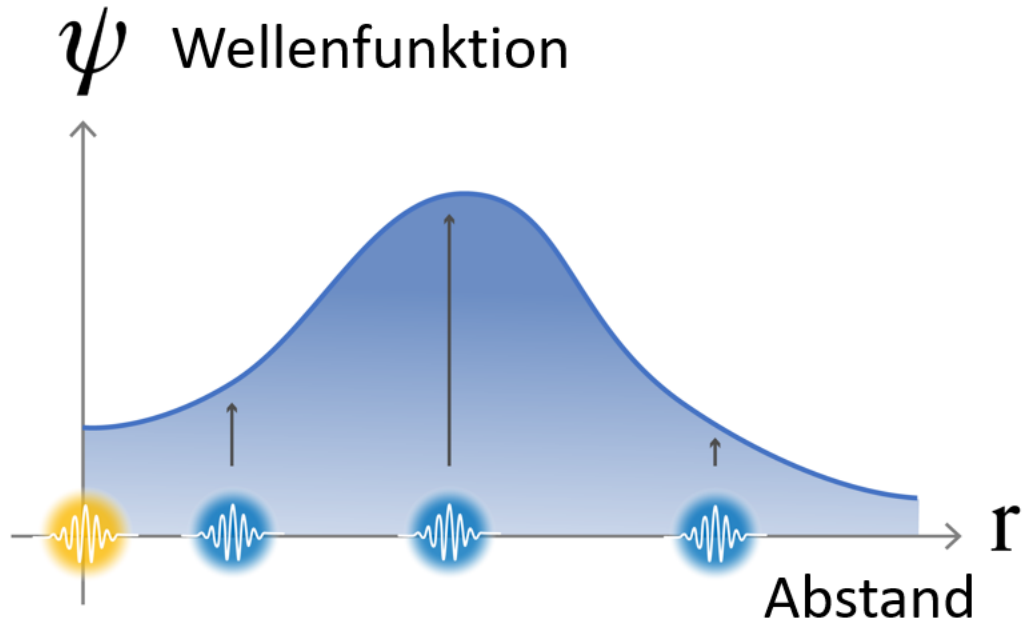
y-Richtung: ↓3 ↓2 ↓1 1↑ 2↑ 3↑

Wellenfunktion berechnen



Monte-Carlo-Methode

1. Quantenteilchen auswählen
2. in x-Richtung verschieben
3. in y-Richtung verschieben
4. Wellenfunktion berechnen
5. akzeptieren oder ablehnen

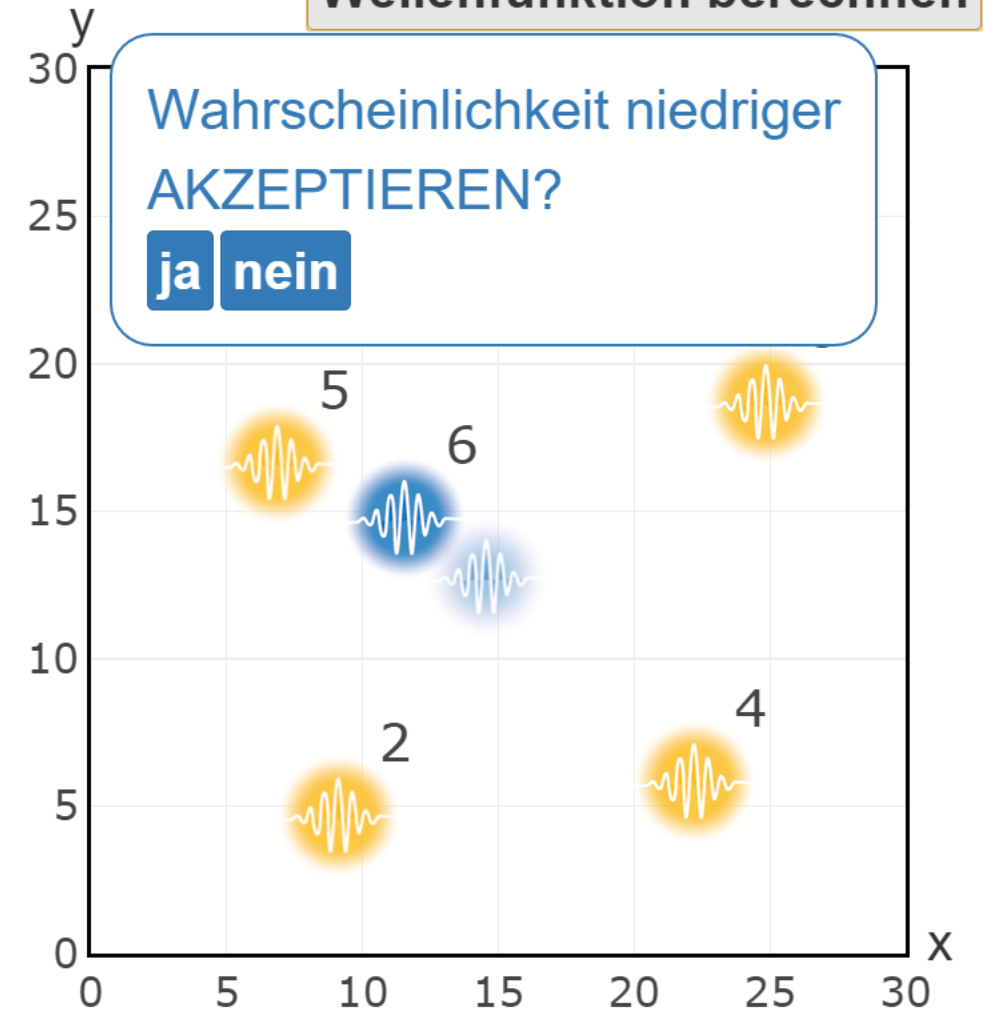


Atom Nr.: 1 2 3 4 5 6

x-Richtung: ←3 ←2 ←1 1→ 2→ 3→

y-Richtung: ↓3 ↓2 ↓1 1↑ 2↑ 3↑

Wellenfunktion berechnen



Monte-Carlo-Methode

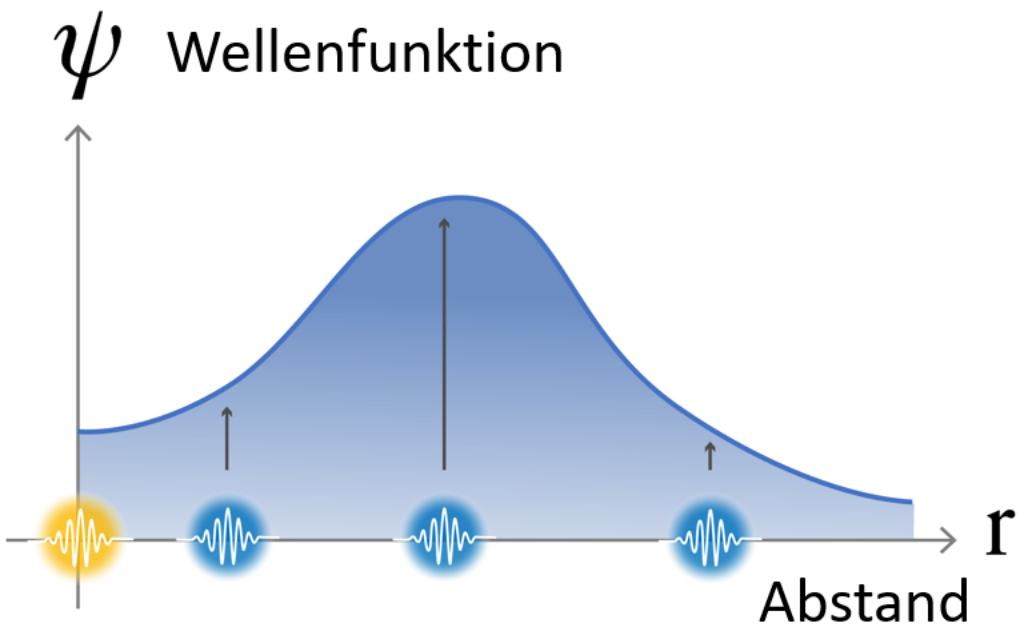
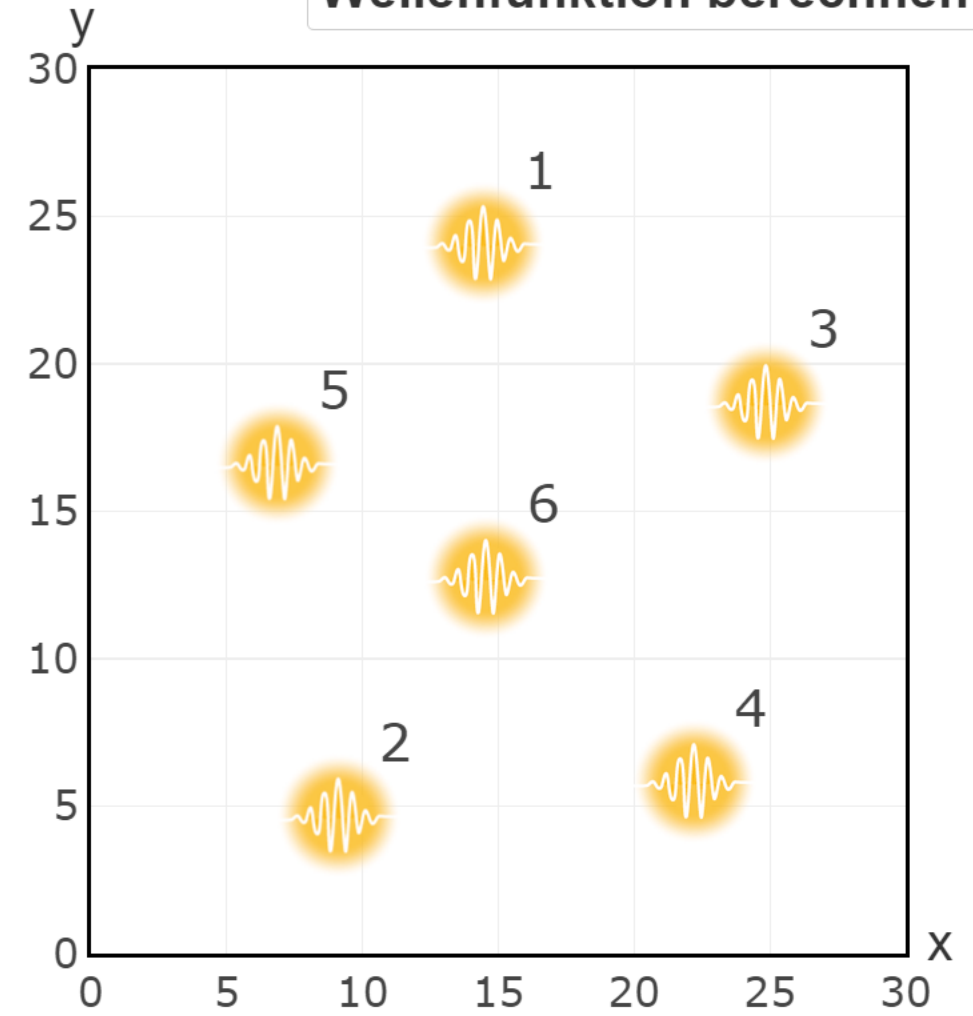
1. Quantenteilchen auswählen
2. in x-Richtung verschieben
3. in y-Richtung verschieben
4. Wellenfunktion berechnen
5. akzeptieren oder ablehnen

Atom Nr.: 1 2 3 4 5 6

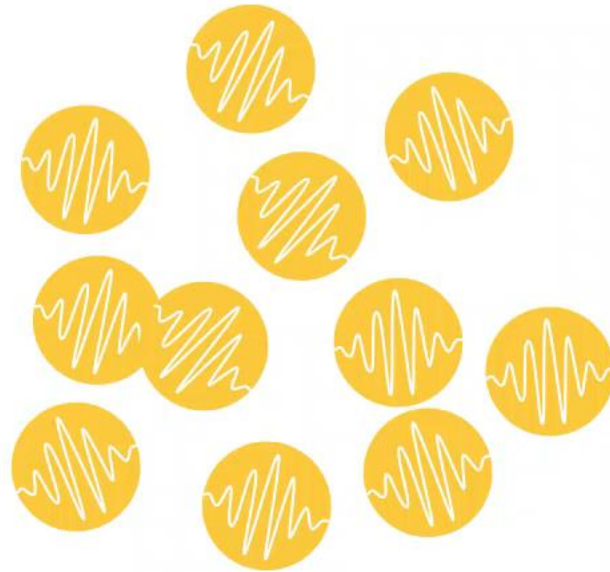
x-Richtung: ←3 ←2 ←1 1→ 2→ 3→

y-Richtung: ↓3 ↓2 ↓1 1↑ 2↑ 3↑

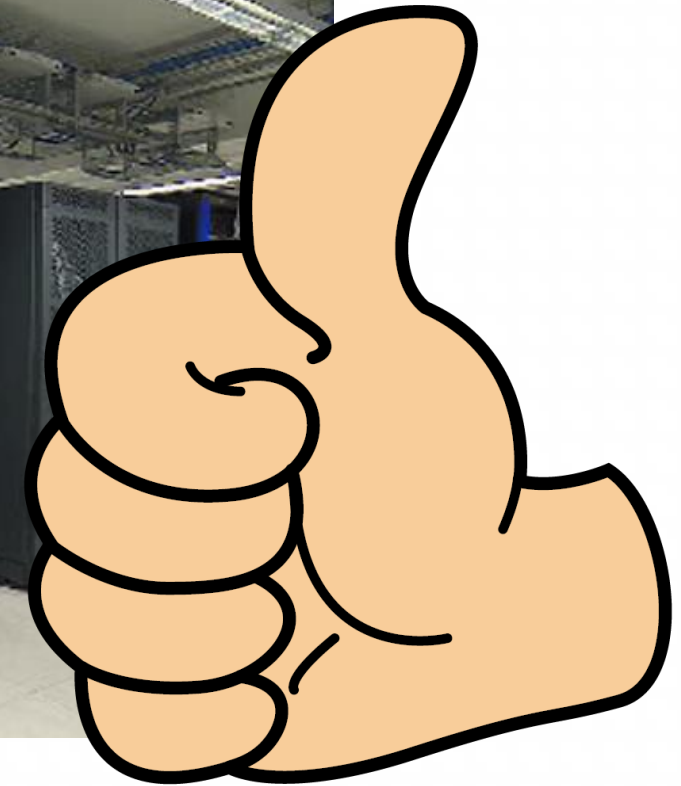
Wellenfunktion berechnen



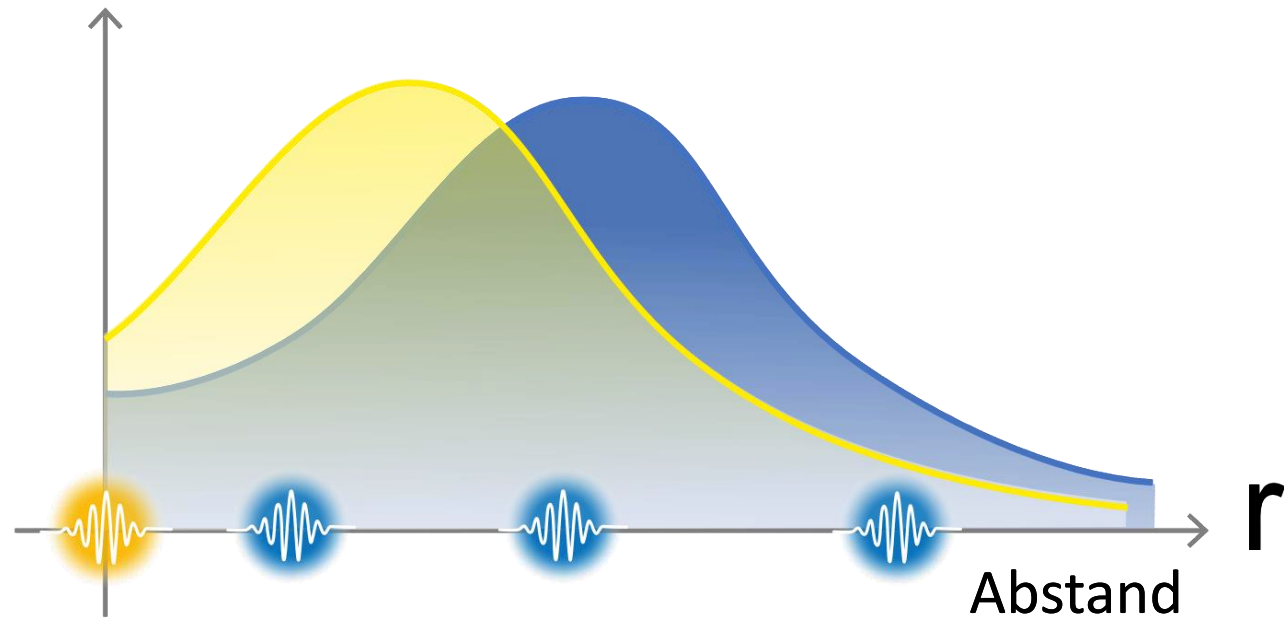
100.000.000.000

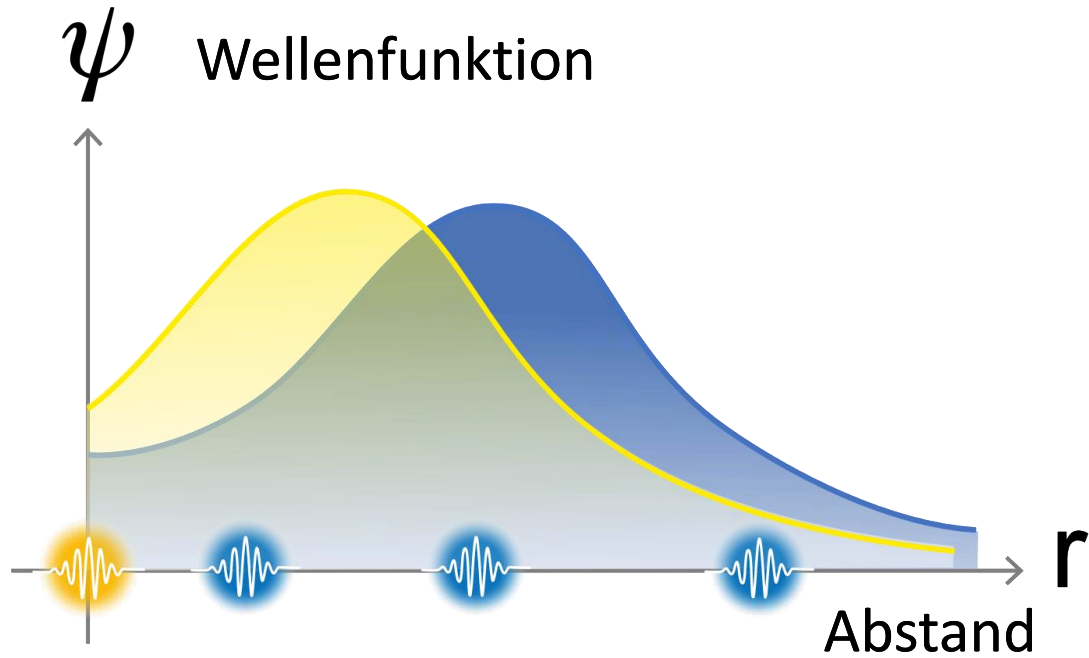


100.000.000.000

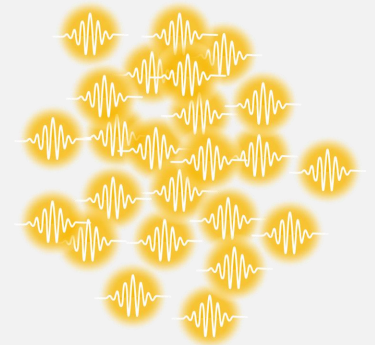


ψ Wellenfunktion

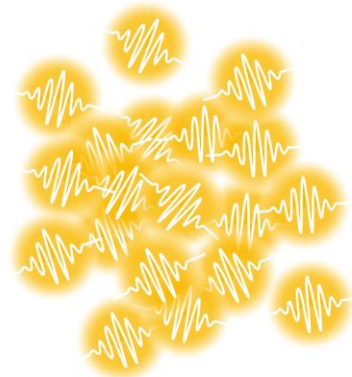
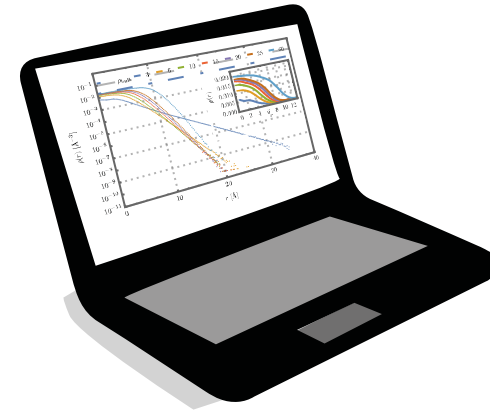
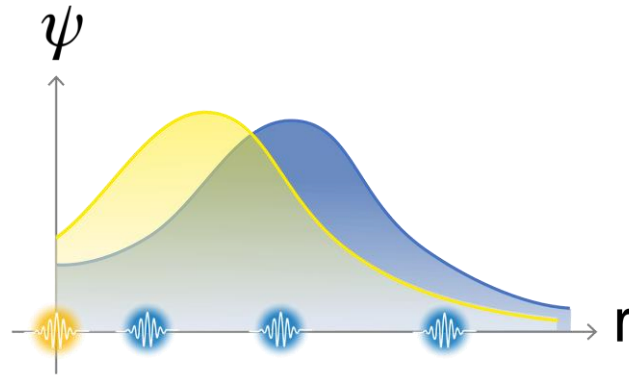
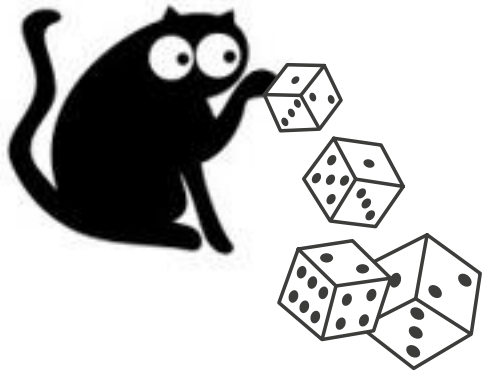




- Anordnungen „zufällig“ erzeugen
- besseres Verständnis von komplexen **Vielteilchensystemen**
- neue Technologien wie der **Quantencomputer**
- **es macht Spaß!**



Danke für eure Aufmerksamkeit :-)



Quellenangaben:

- Folie 4, Neutronenstern: <https://www.spacetelescope.org/images/potw1142a/>
- Folie 4, Quantencomputer: <https://www.ibm.com/blogs/ibm-anz/wp-content/uploads/2018/06/Screen-Shot-2018-06-28-at-3.41.01-pm.png>
- Folie 4, qiskit: <https://qiskit.org/>
- Folie 5, Erwin Schrödinger: <https://www.oeaw.ac.at/online-gedenkbuch/gedenkbuch/personen/q-z/erwin-schroedinger/>
- Folie 5, Katze: https://all-free-download.com/free-vector/download/cats-vector_266265.html
- Folie 8, Mach2: <https://ooe.orf.at/news/stories/2896337/>
- Folie 10, Karte: <https://www.google.at/maps>
- Folie 10, Monte-Carlo-Simulation: <https://de.wikipedia.org/wiki/Monte-Carlo-Simulation>