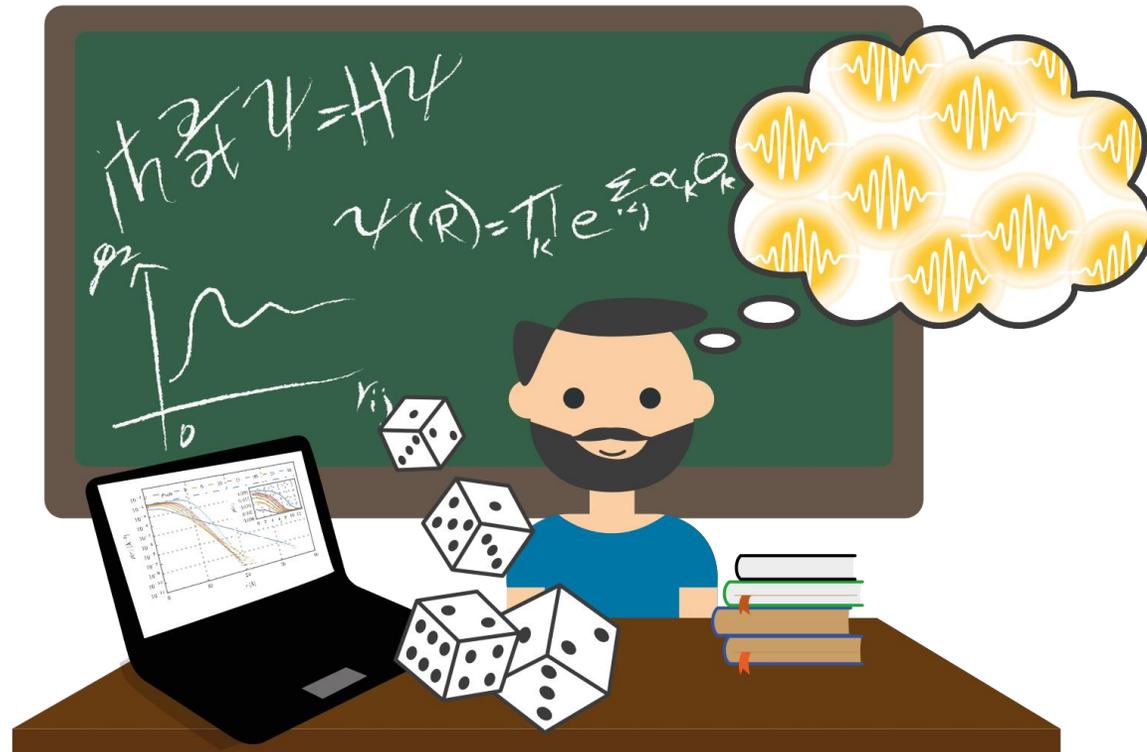


# Mit dem Zufall rechnen – Quantenteilchen zähmen leicht gemacht

Mathias Gartner

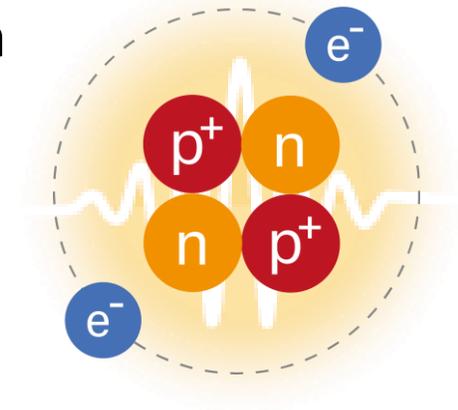


# Was sind Quantenteilchen?



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

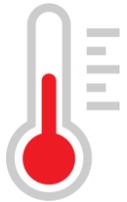
Helium-Atom



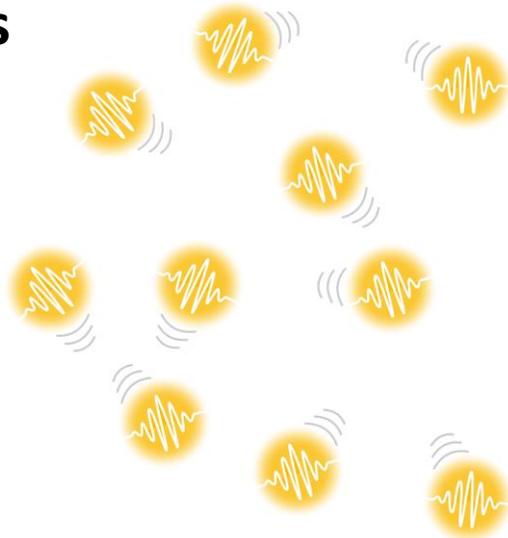
# Was sind Quantenteilchen?



**gasförmiges**  
Helium



20°C

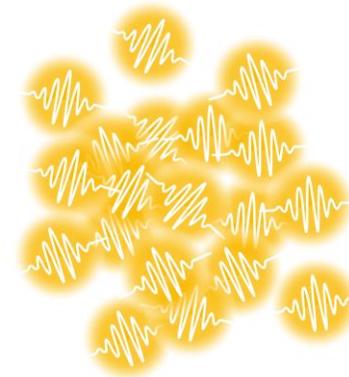


**flüssiger**  
Helium-Tropfen



-269°C

absoluter Nullpunkt -273°C

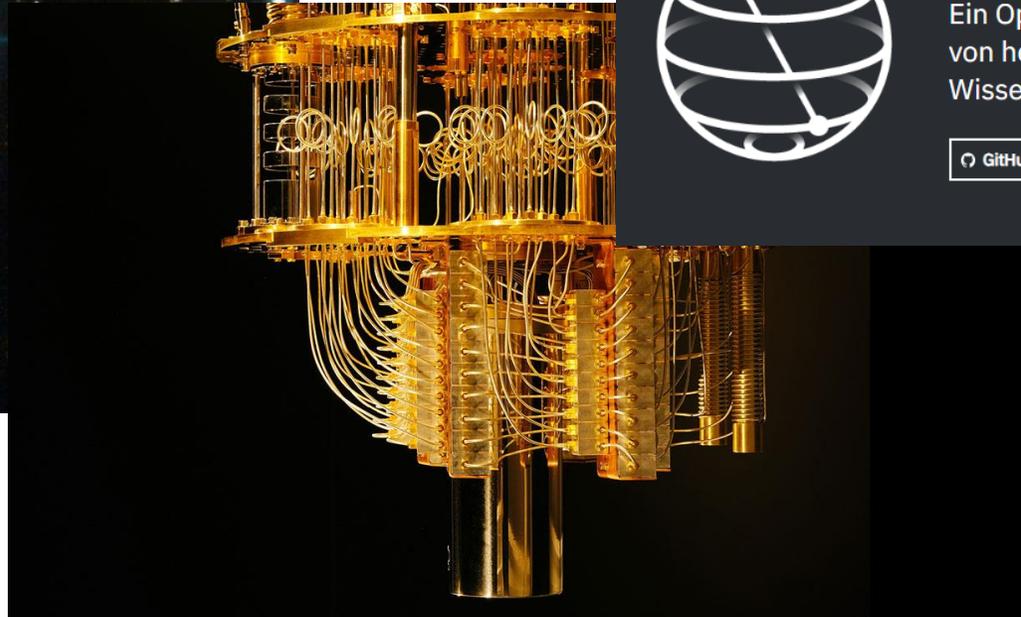


Was passiert,  
wenn sich viele Quantenteilchen  
**gegenseitig beeinflussen?**



# Antwort ist wichtig für...

## Astrophysik - Neutronensterne



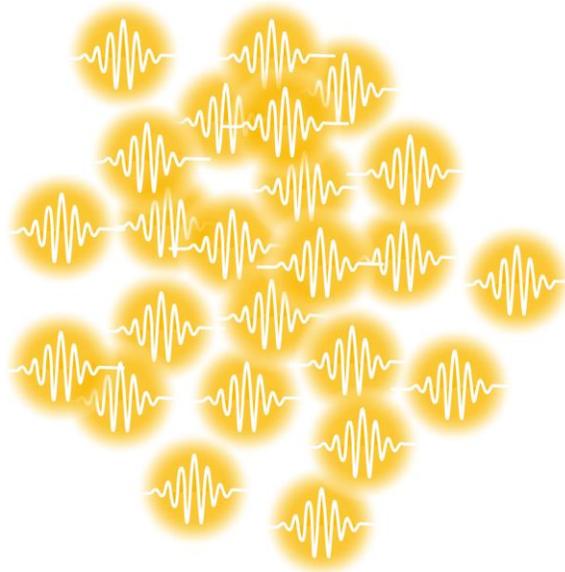
Quantencomputer



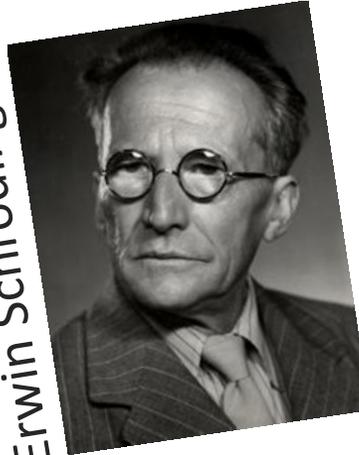
[www.qiskit.org](https://www.qiskit.org)

## Interessante Eigenschaften

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



Erwin Schrödinger



Schrödinger Gleichung

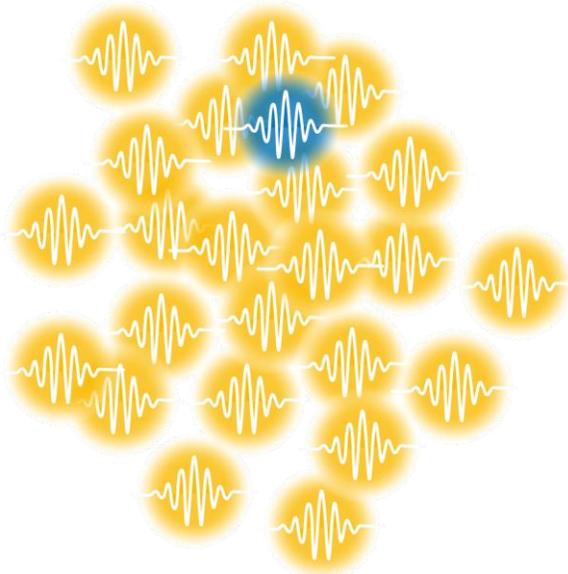


$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) = \hat{H} \psi(\mathbf{r}, t)$$

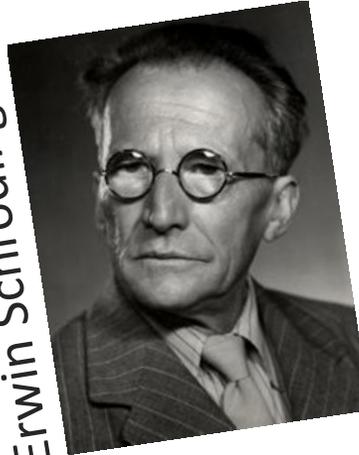
Wellenfunktion

## Interessante Eigenschaften

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



Erwin Schrödinger



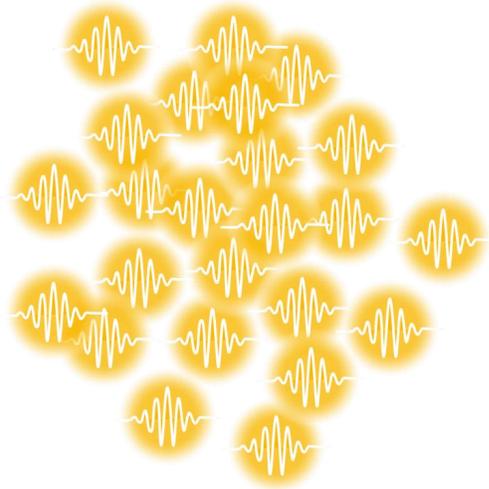
Schrödinger Gleichung



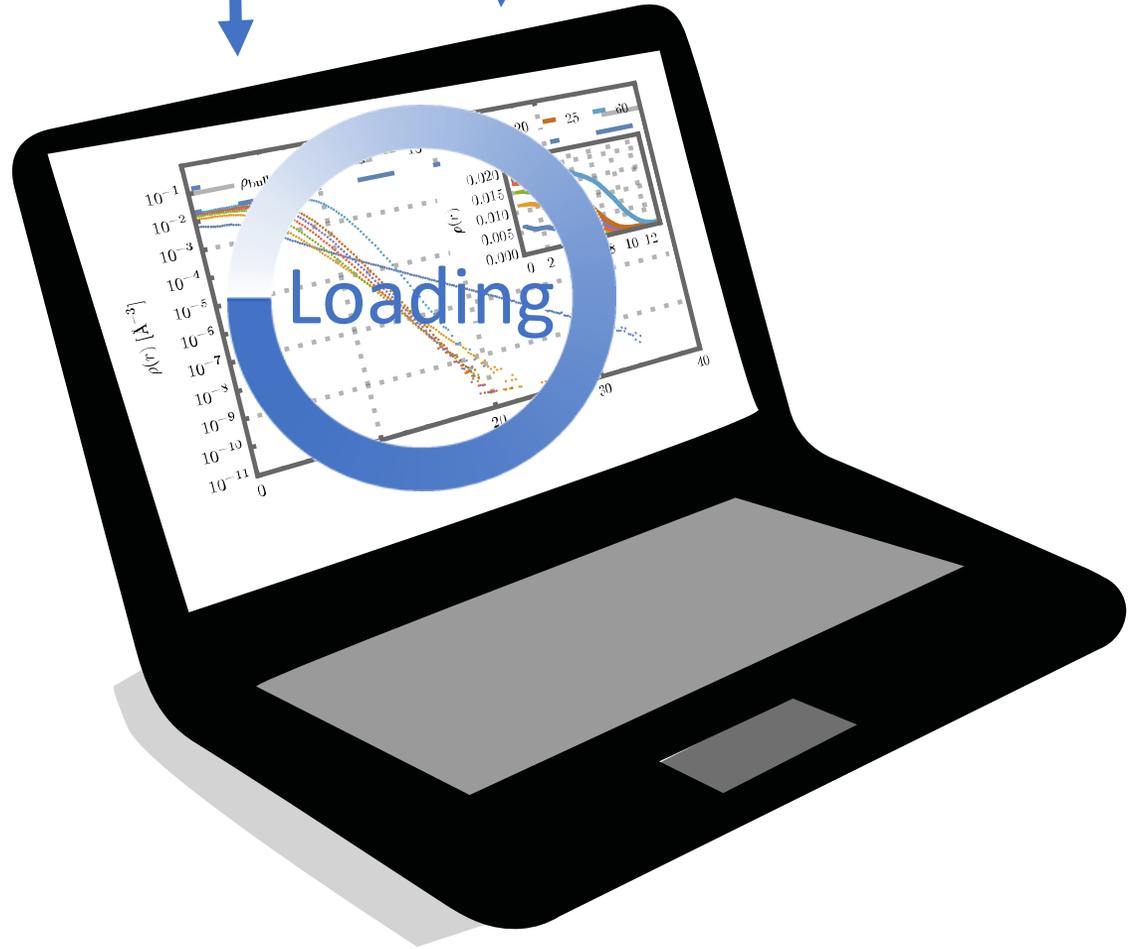
$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) = \hat{H} \psi(\mathbf{r}, t)$$

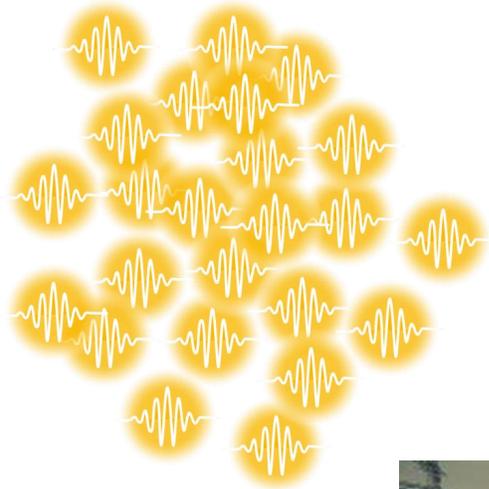
Wellenfunktion

- 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](#)

Browser address bar: <https://de.wikipedia.org/wiki/Monte-Carlo-Simulation>

Navigation: Artikel | **Diskussion** | Lesen | Bearbeiten | Quelltext bearbeiten | Versionsgeschichte

User: Nicht angemeldet | [Diskussionsseite](#) | [Beiträge](#) | [Benutzerkonto erstellen](#) | [Anmelden](#)

Search:

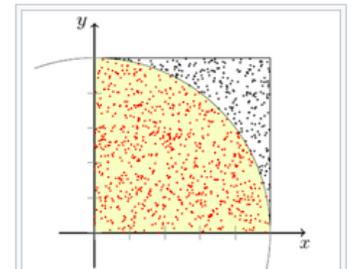
## Monte-Carlo-Simulation

**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.

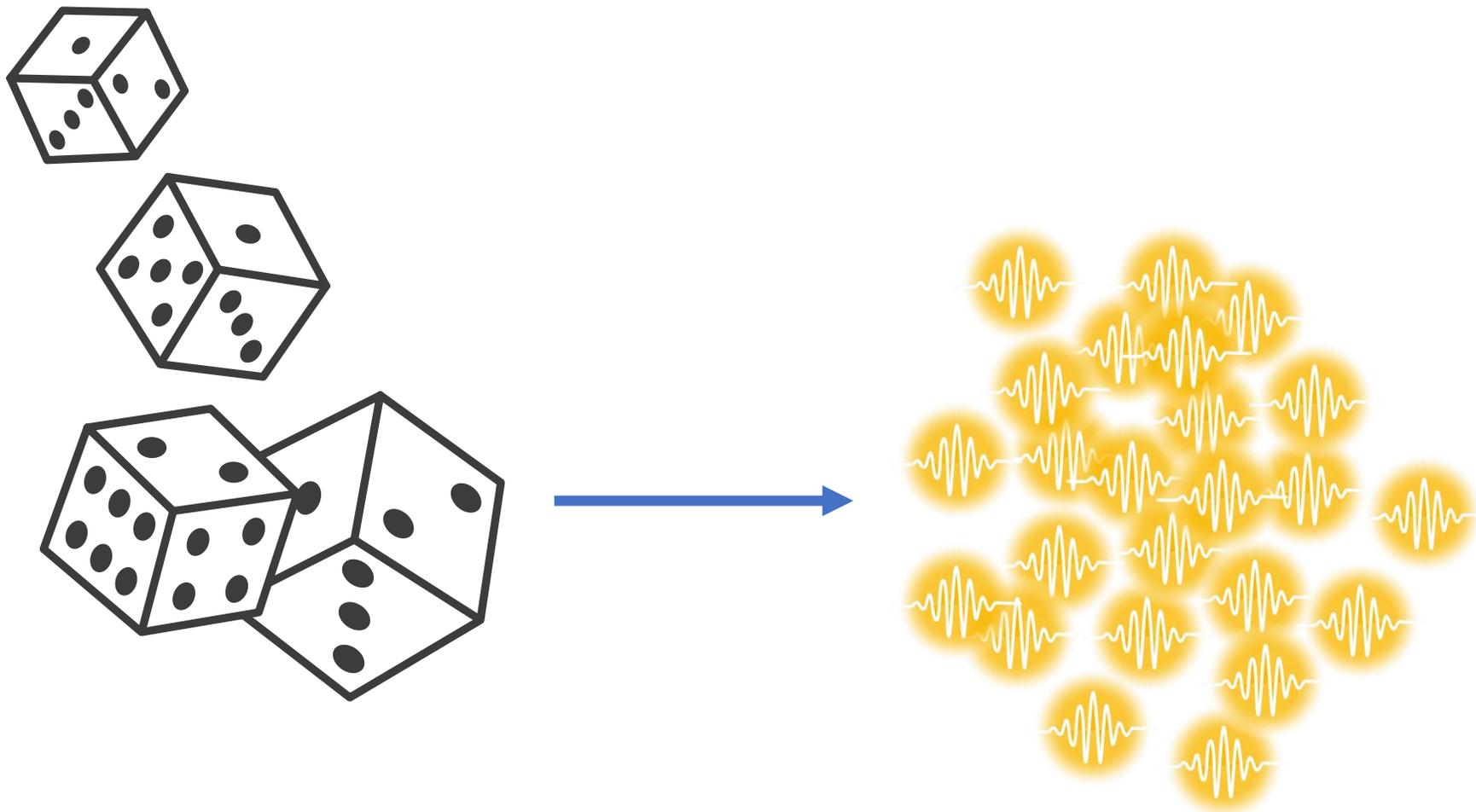
Zu den Pionieren der Monte-Carlo-Methode in den 1940er Jahren gehören **Stanislaw Ulam**, **Nicholas Metropolis** und **John von Neumann**.

### 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

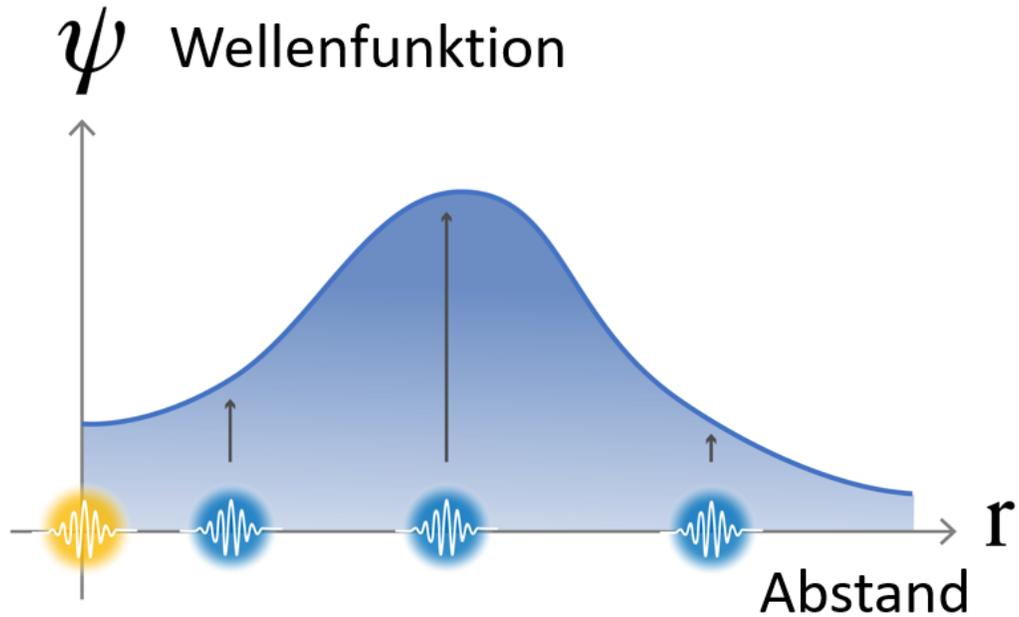


Die Kreiszahl  $\pi$  wird mit der Monte-Carlo-Methode angenähert bestimmt durch das Vierfache der Wahrscheinlichkeit, mit der ein innerhalb des Quadrats zufällig gewählter Punkt in den Kreis fällt. Aufgrund des Gesetzes der großen Zahlen sinkt mit steigender Anzahl von Experimenten die Varianz des Ergebnisses.



# 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

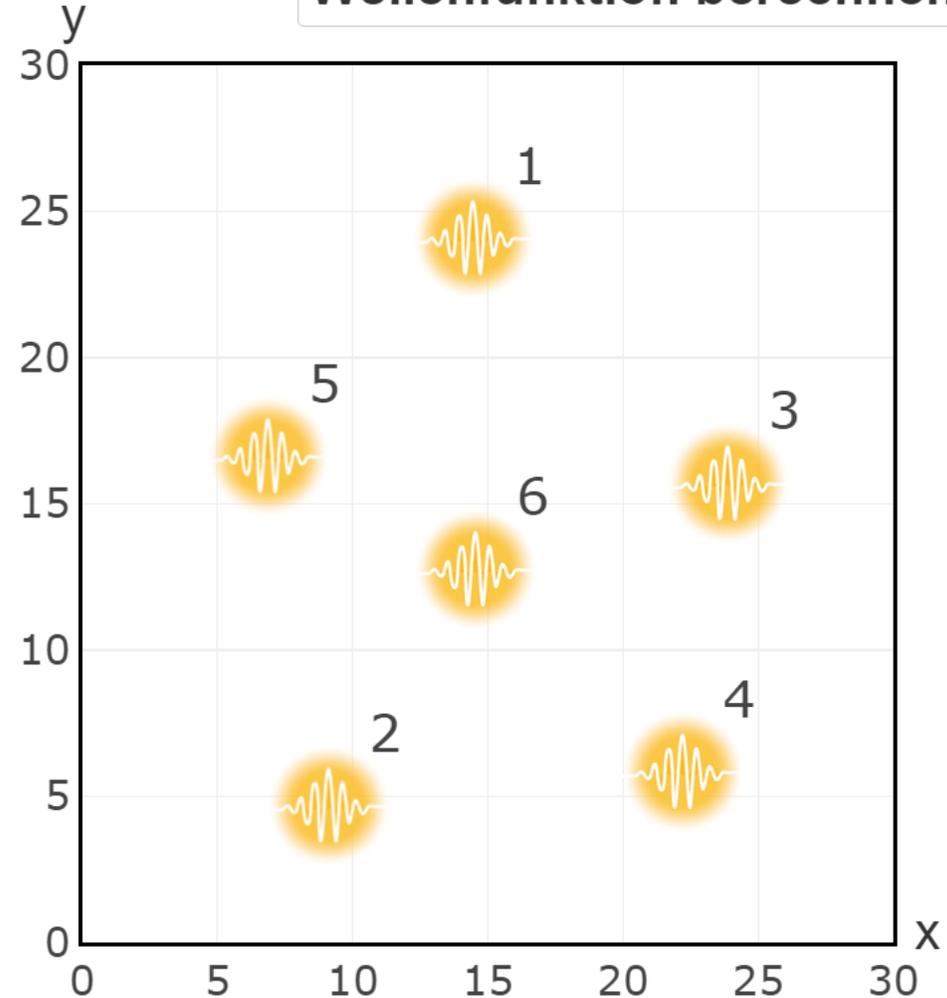
x-Richtung:

←3 ←2 ←1 1→ 2→ 3→

y-Richtung:

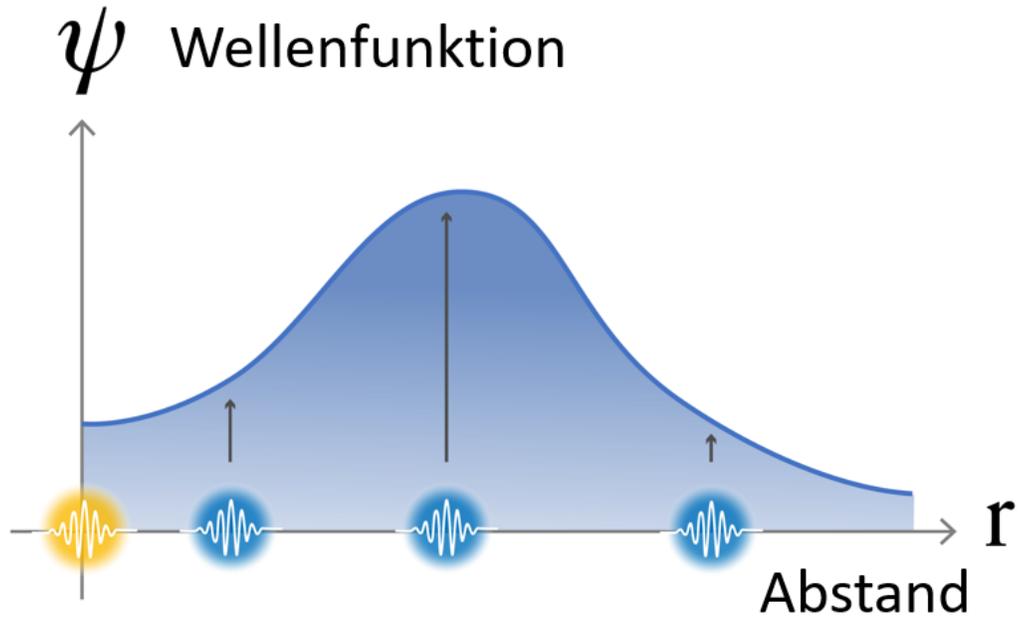
↓3 ↓2 ↓1 1↑ 2↑ 3↑

**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

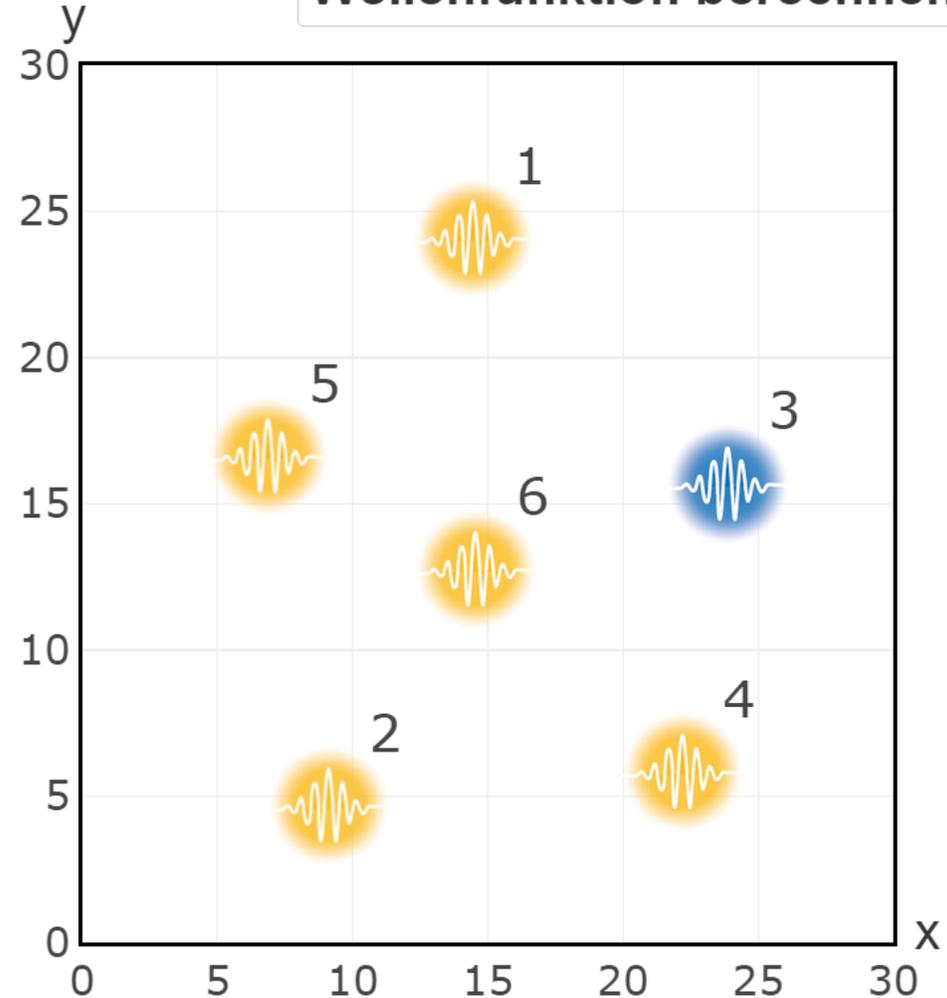
x-Richtung:

- ←3
- ←2
- ←1
- 1→
- 2→
- 3→

y-Richtung:

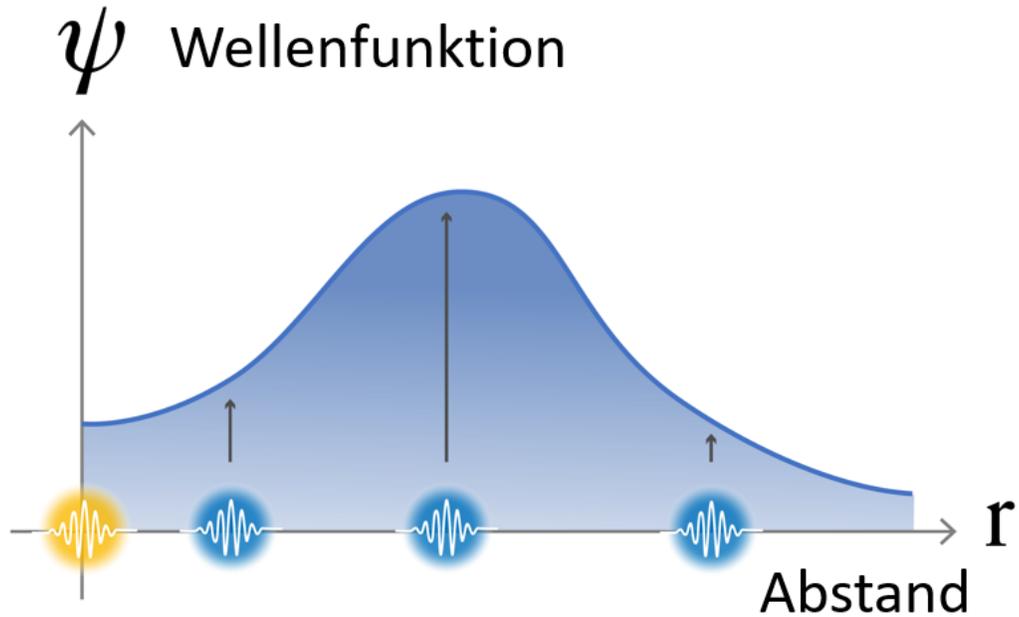
- ↓3
- ↓2
- ↓1
- 1↑
- 2↑
- 3↑

**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

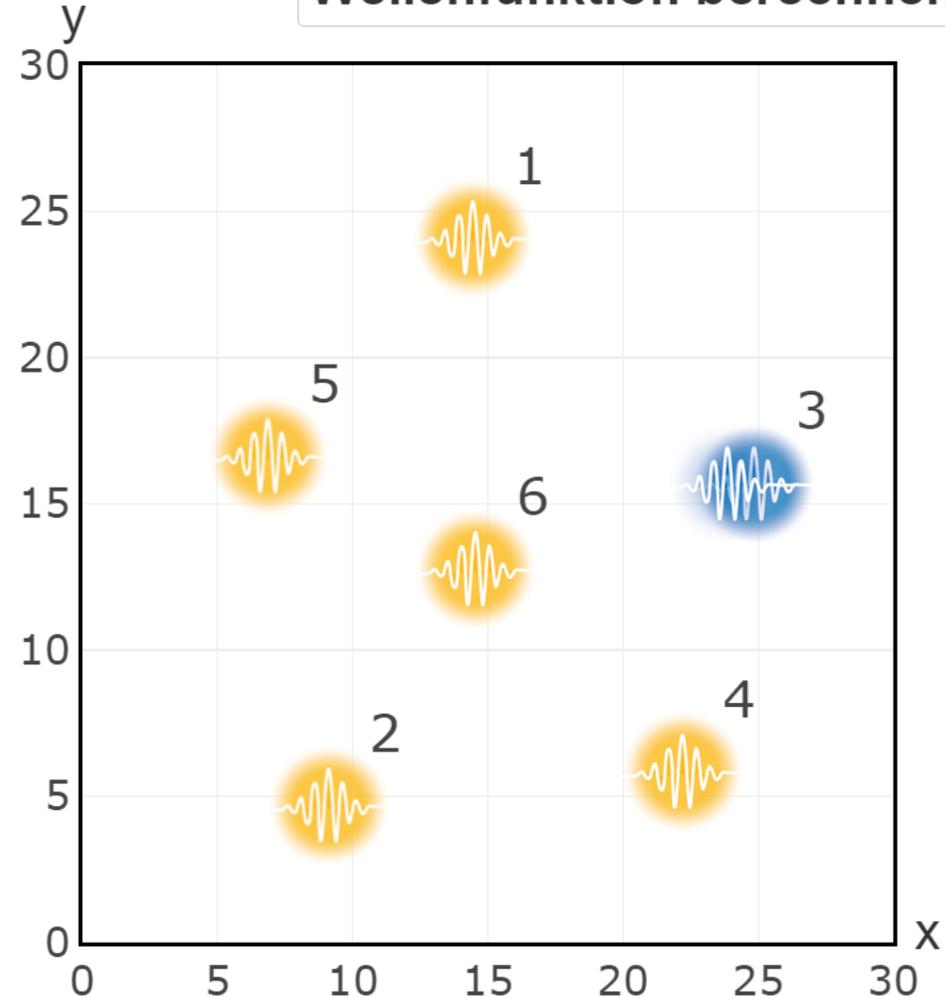
x-Richtung:

←3 ←2 ←1 1→ 2→ 3→

y-Richtung:

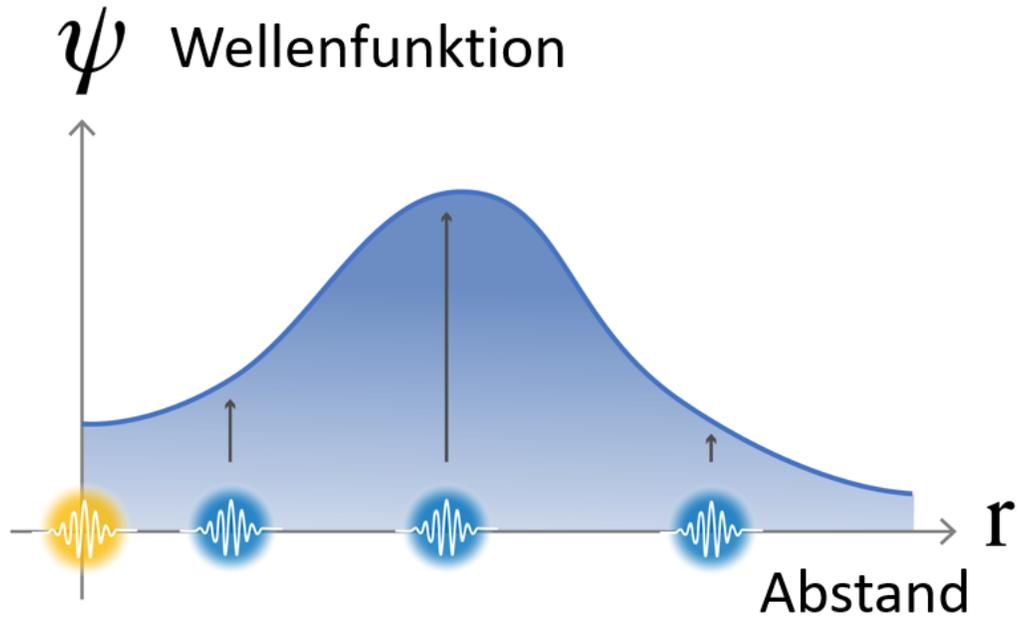
↓3 ↓2 ↓1 1↑ 2↑ 3↑

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

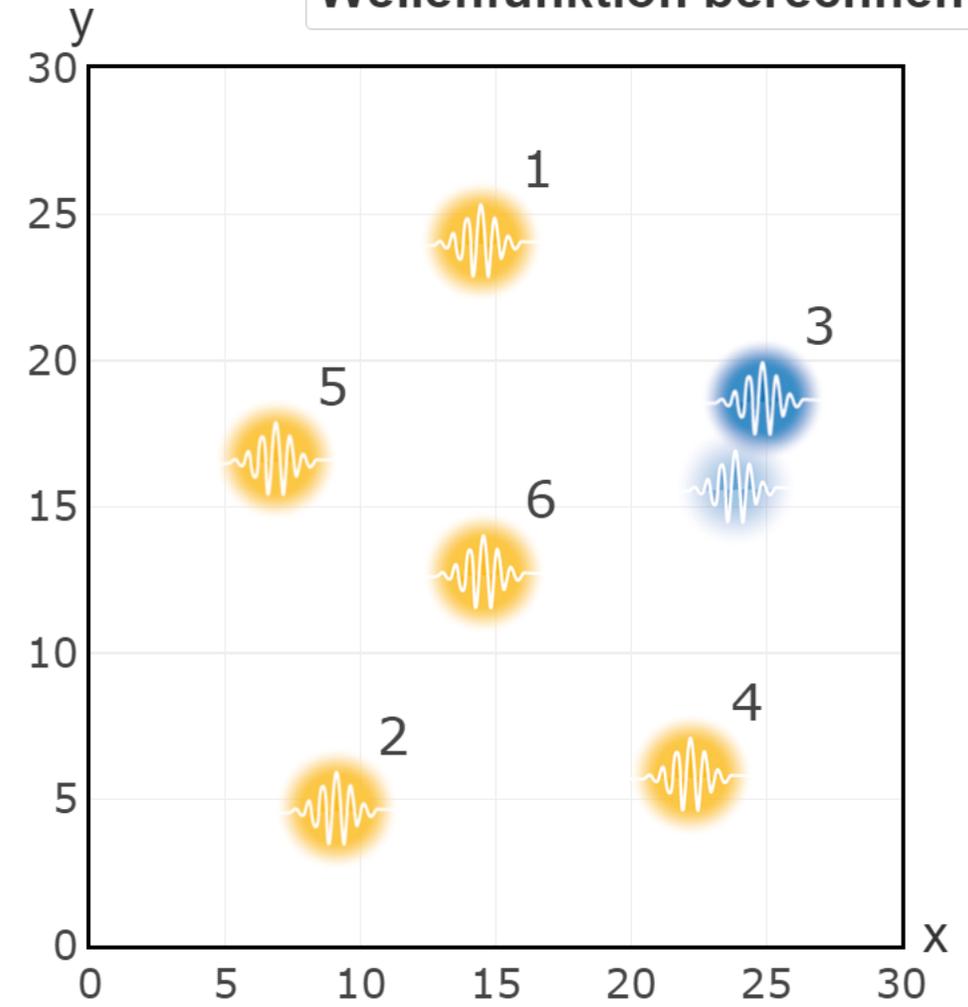


Atom Nr.: 1 2 3 4 5 6

x-Richtung: ←3 ←2 ←1 1→ 2→ 3→

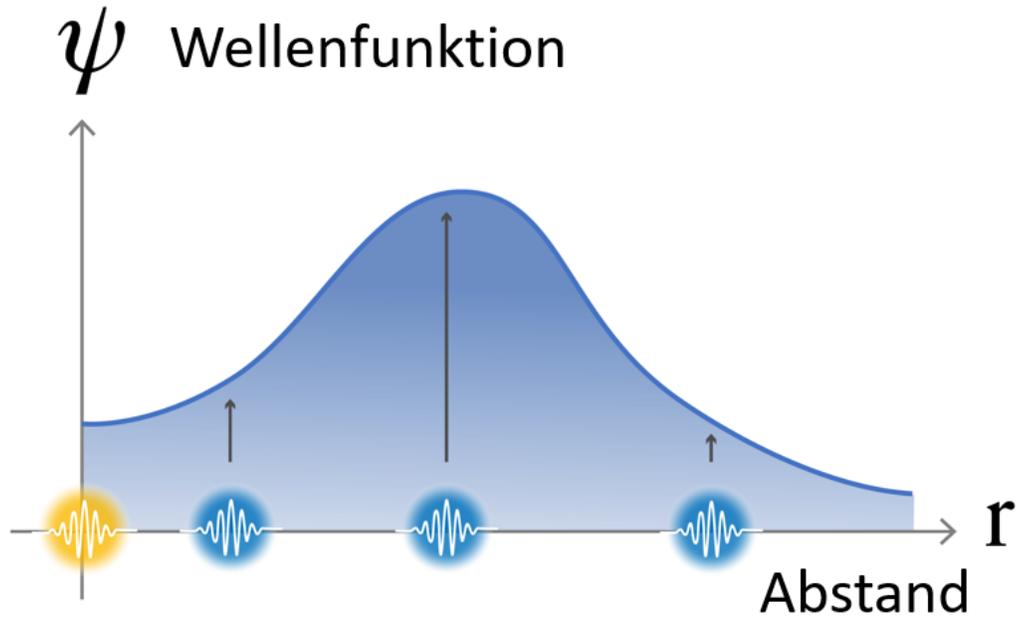
y-Richtung: ↓3 ↓2 ↓1 1↑ 2↑ 3↑

**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

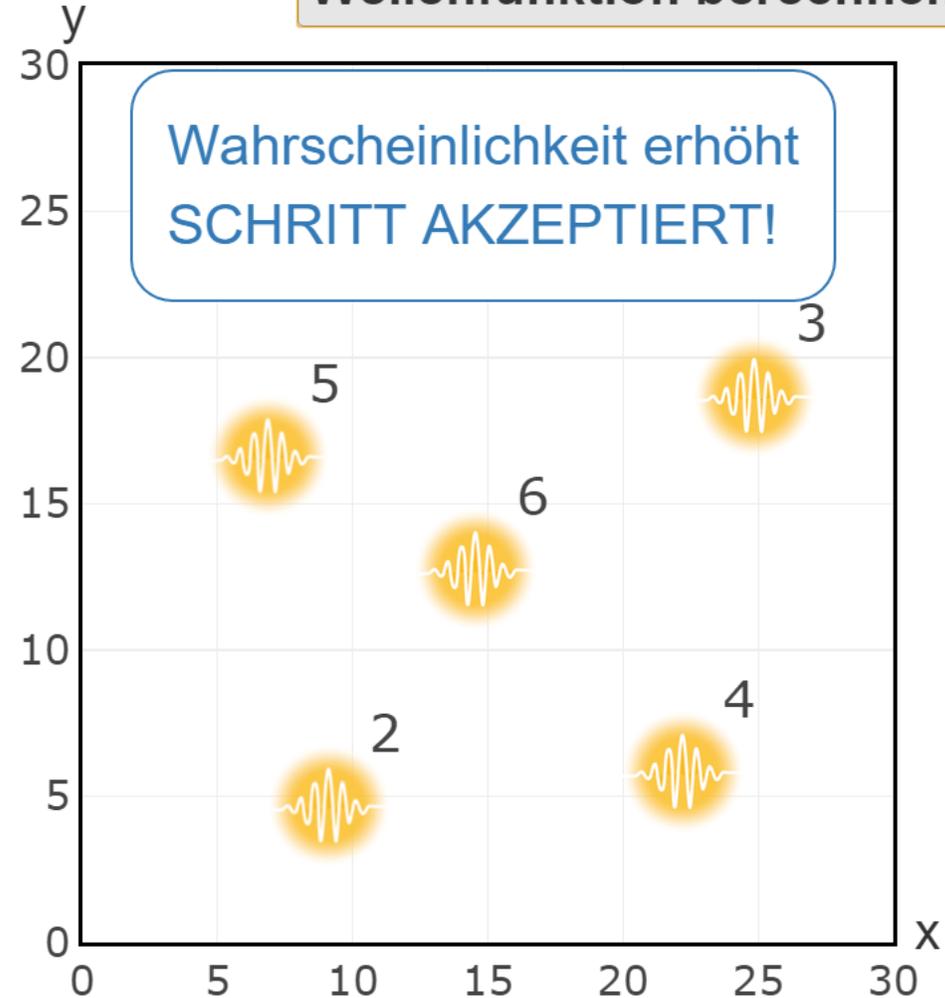
x-Richtung:

←3 ←2 ←1 1→ 2→ 3→

y-Richtung:

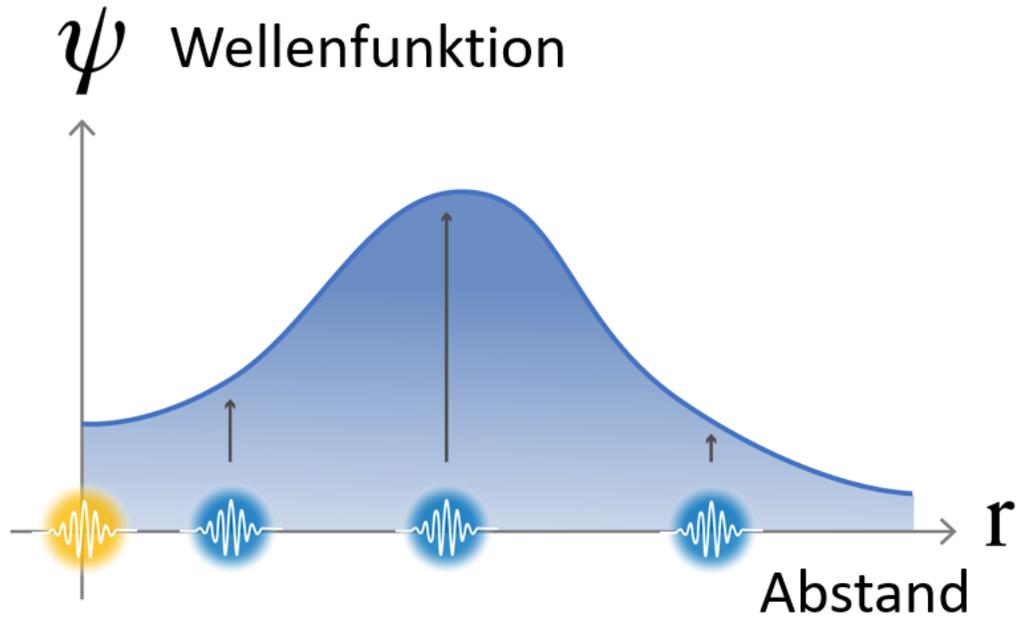
↓3 ↓2 ↓1 1↑ 2↑ 3↑

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
---	---	---	---	---	---

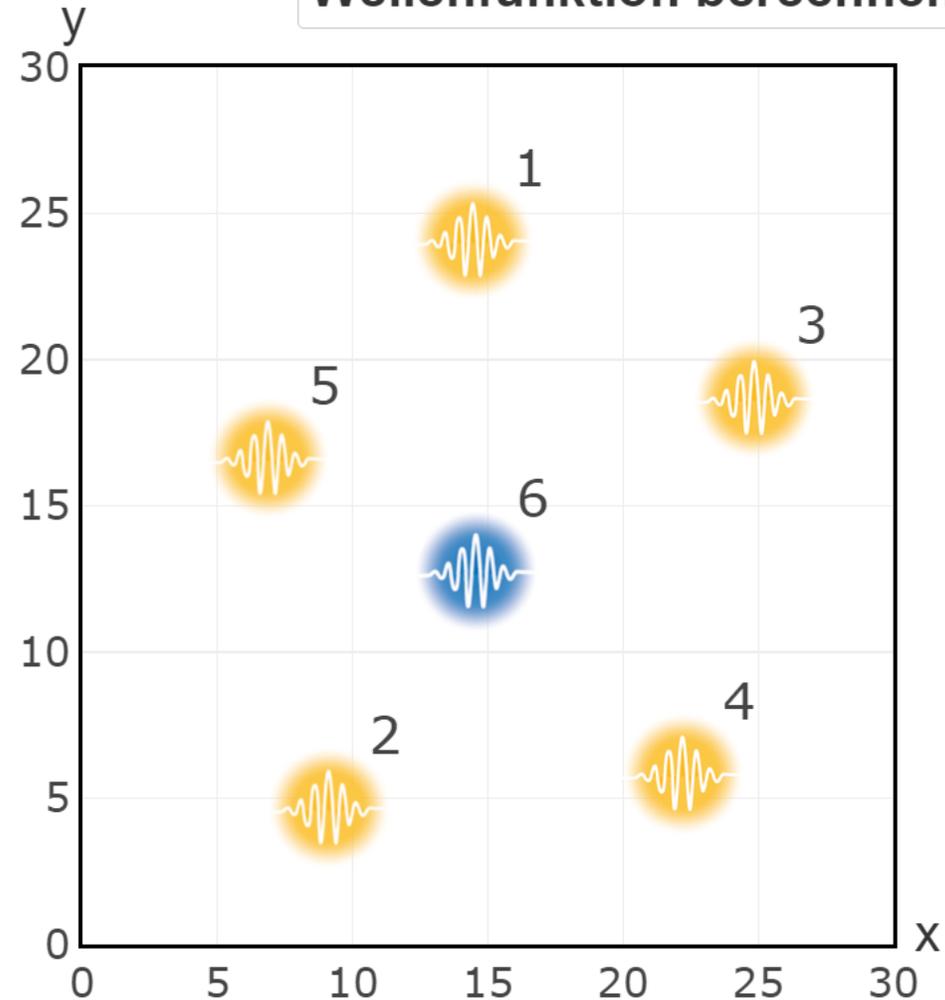
x-Richtung:

←3	←2	←1	1→	2→	3→
----	----	----	----	----	----

y-Richtung:

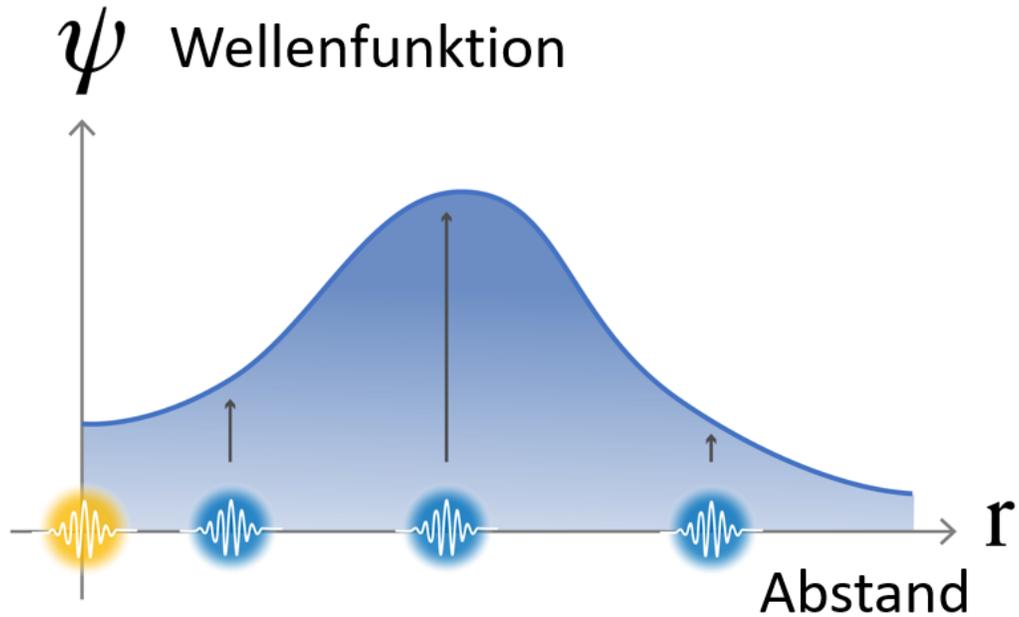
↓3	↓2	↓1	1↑	2↑	3↑
----	----	----	----	----	----

**Wellenfunktion berechnen**



# Monte-Carlo-Methode

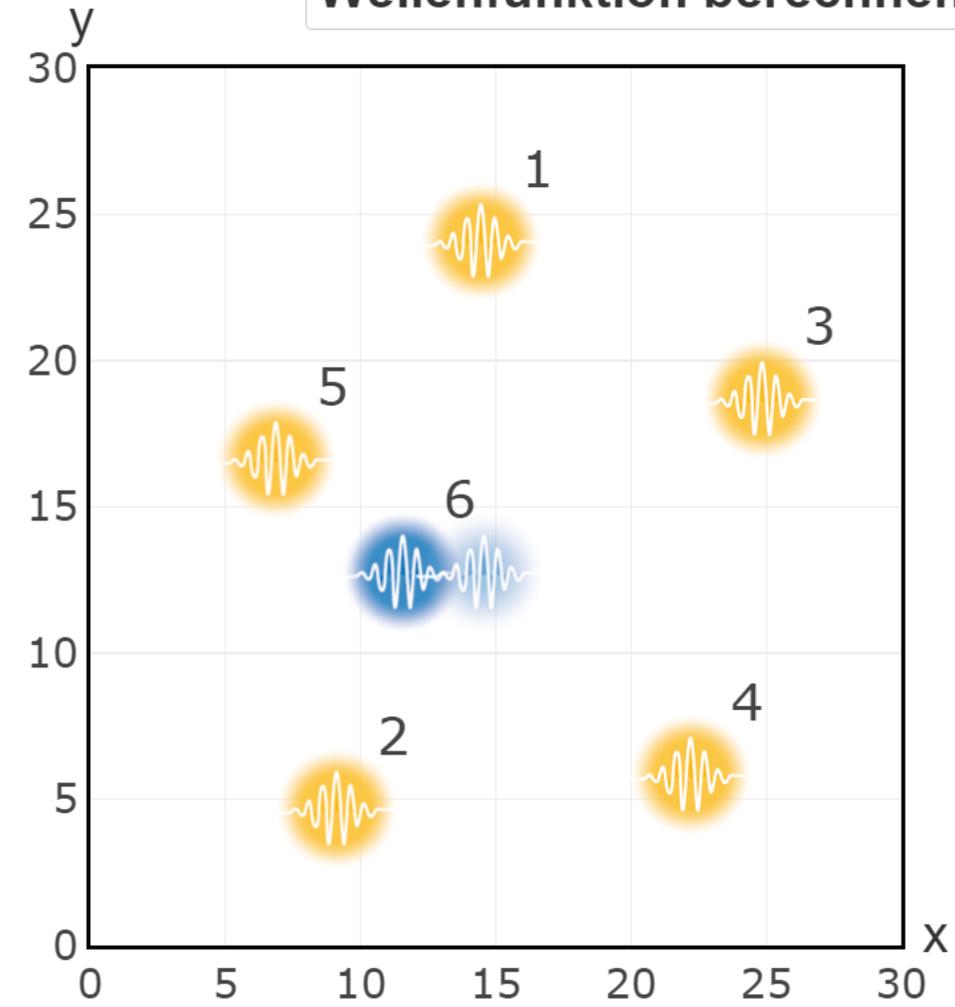
1. Quantenteilchen auswählen
2. in x-Richtung verschieben
3. in y-Richtung verschieben
4. Wellenfunktion berechnen
5. akzeptieren oder ablehnen



Atom Nr.:  1  2  3  4  5  6

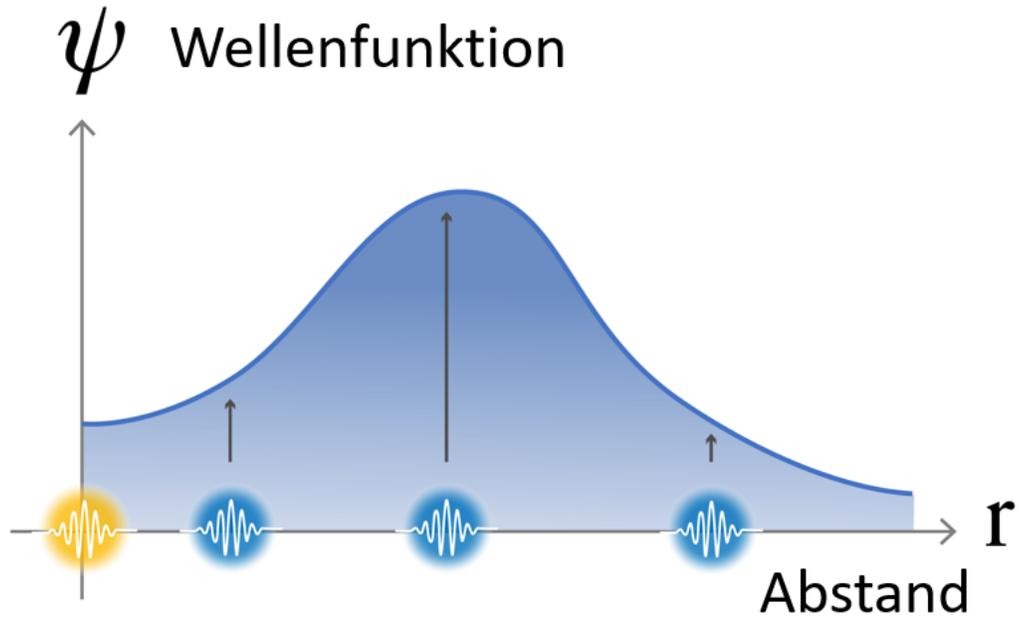
x-Richtung:  ←3  ←2  ←1  1→  2→  3→

y-Richtung:  ↓3  ↓2  ↓1  1↑  2↑  3↑



# Monte-Carlo-Methode

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

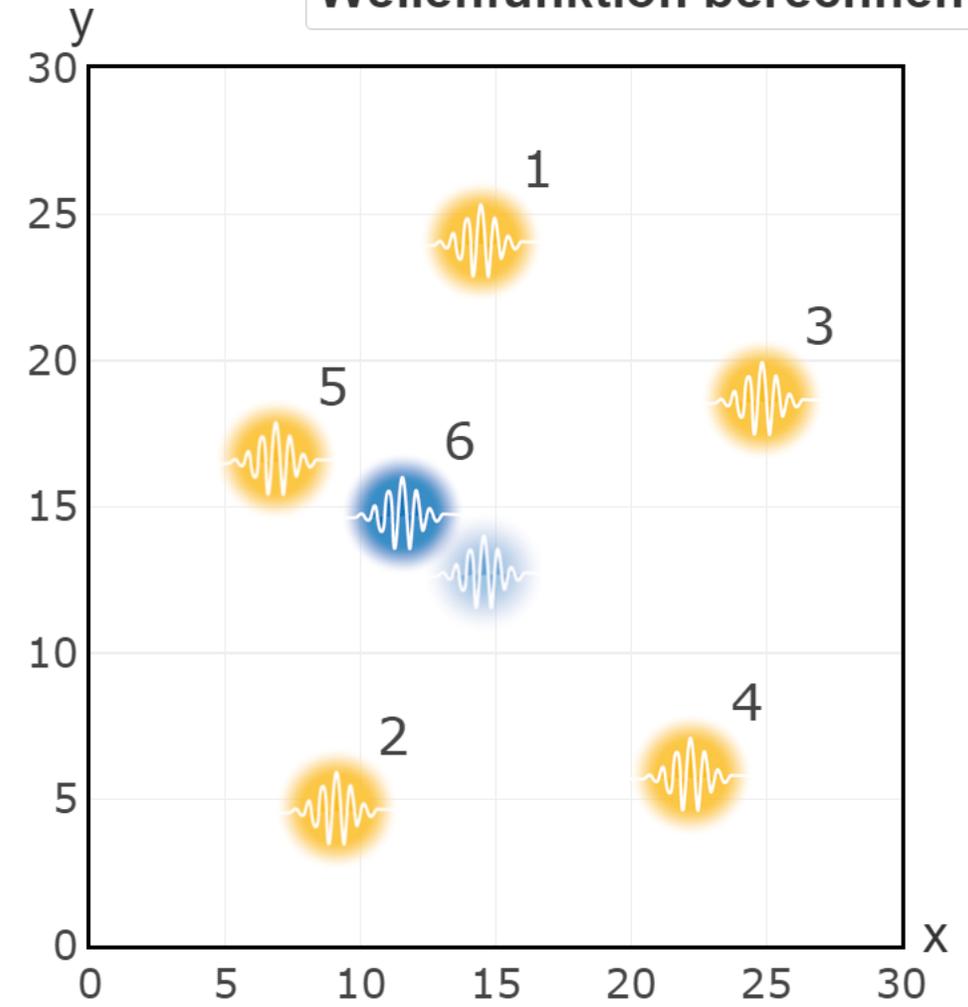


Atom Nr.: 1 2 3 4 5 6

x-Richtung: ←3 ←2 ←1 1→ 2→ 3→

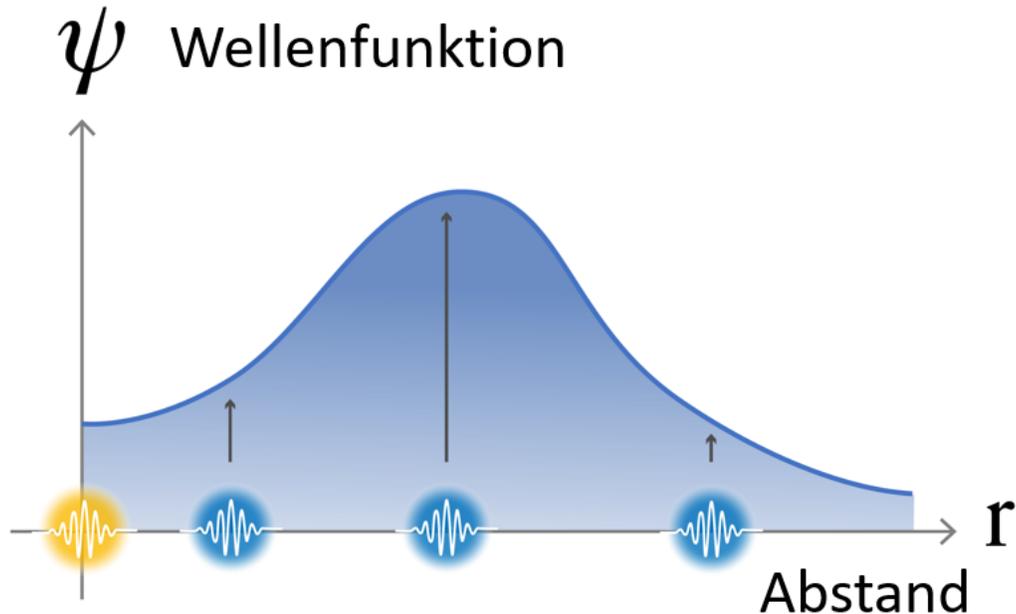
y-Richtung: ↓3 ↓2 ↓1 1↑ 2↑ 3↑

**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

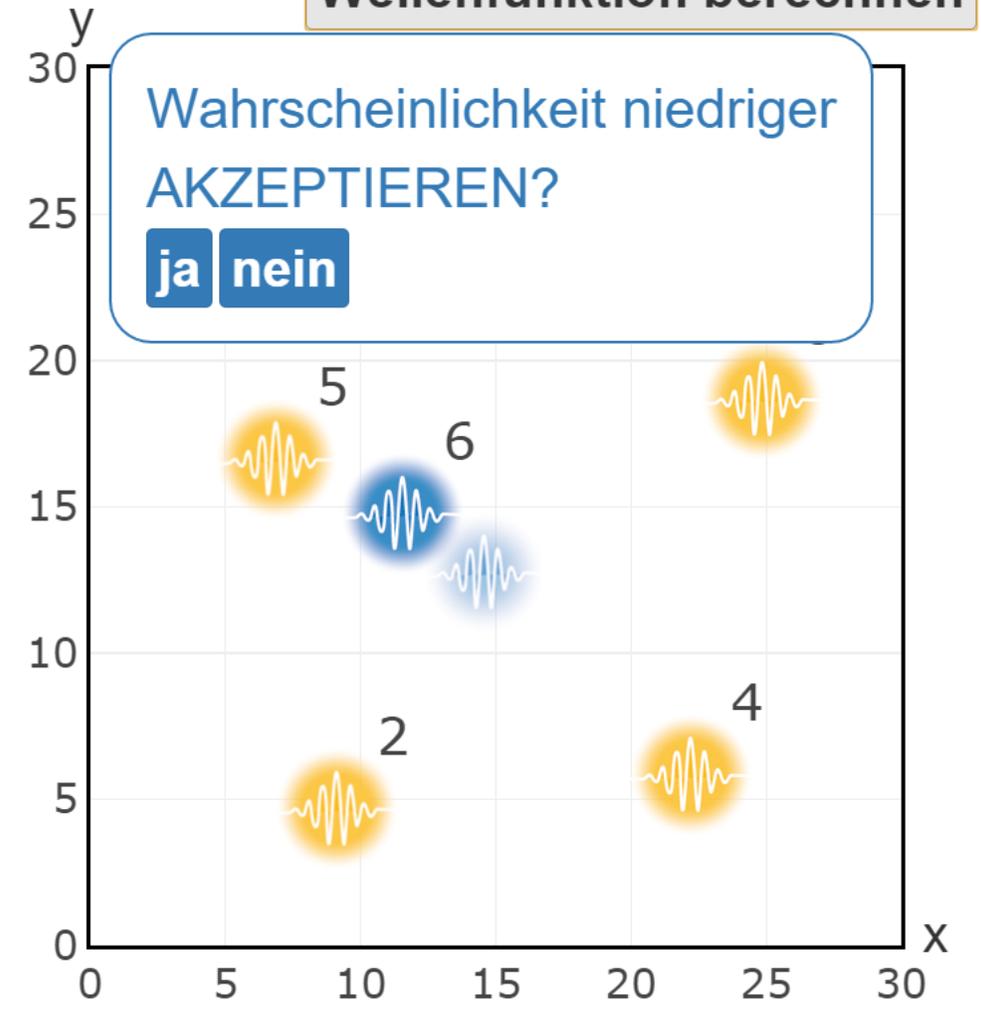


Atom Nr.: 1 2 3 4 5 6

x-Richtung: ←3 ←2 ←1 1→ 2→ 3→

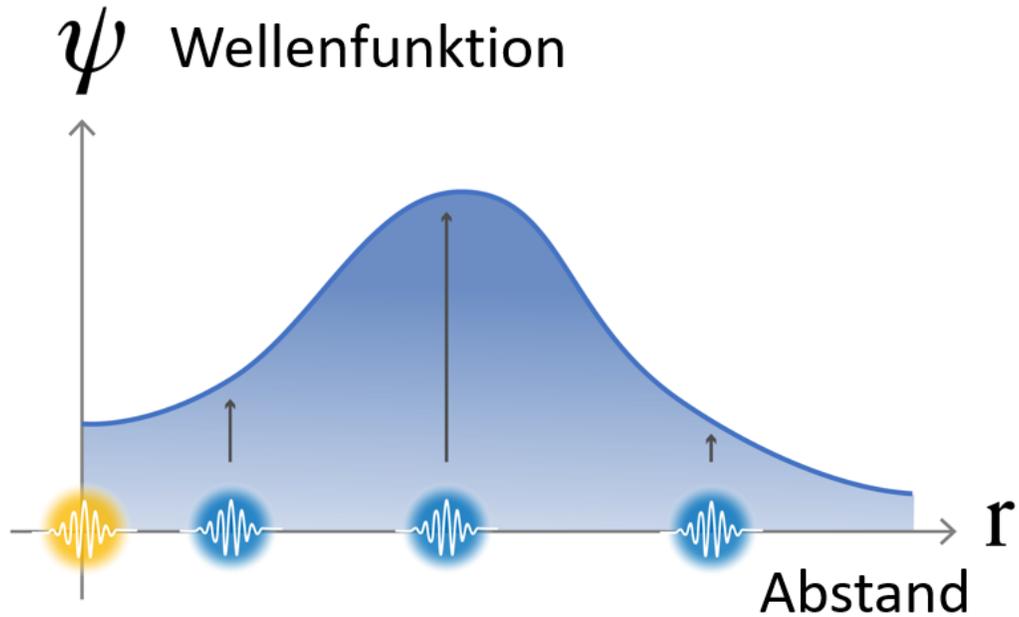
y-Richtung: ↓3 ↓2 ↓1 1↑ 2↑ 3↑

**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

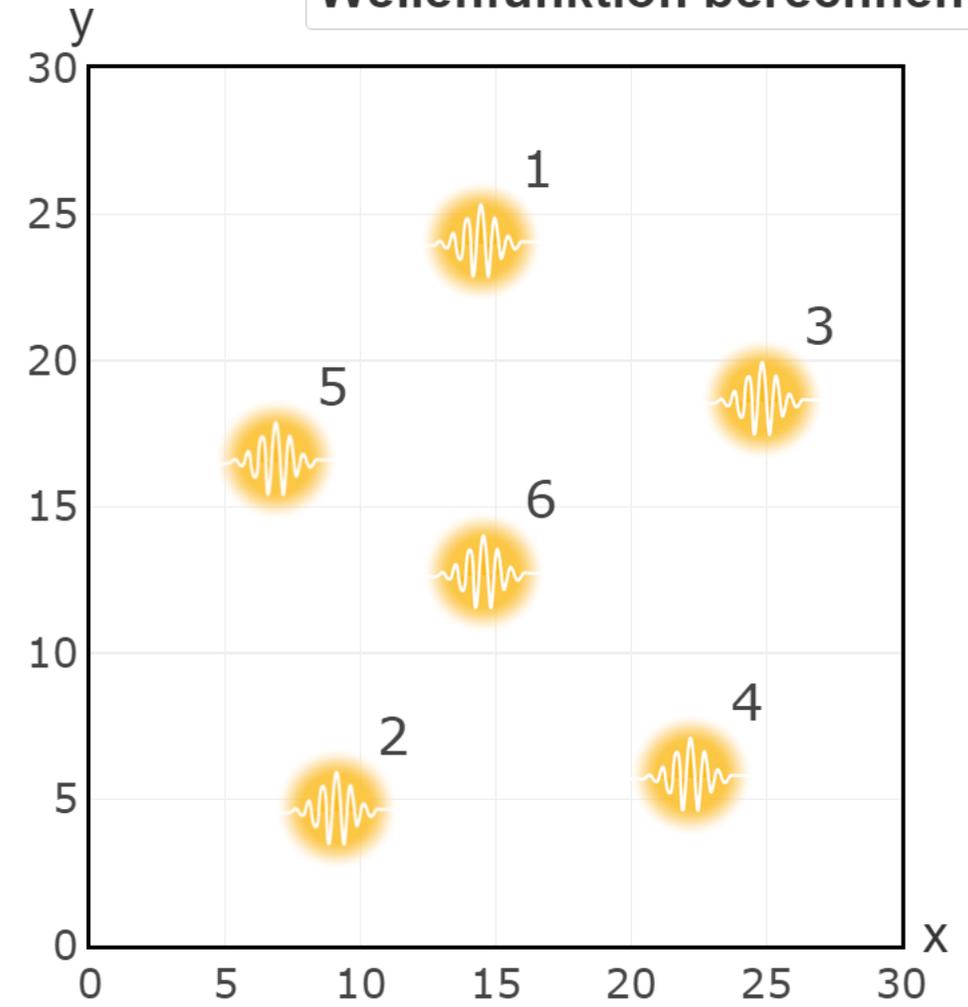


Atom Nr.: 1 2 3 4 5 6

x-Richtung: ←3 ←2 ←1 1→ 2→ 3→

y-Richtung: ↓3 ↓2 ↓1 1↑ 2↑ 3↑

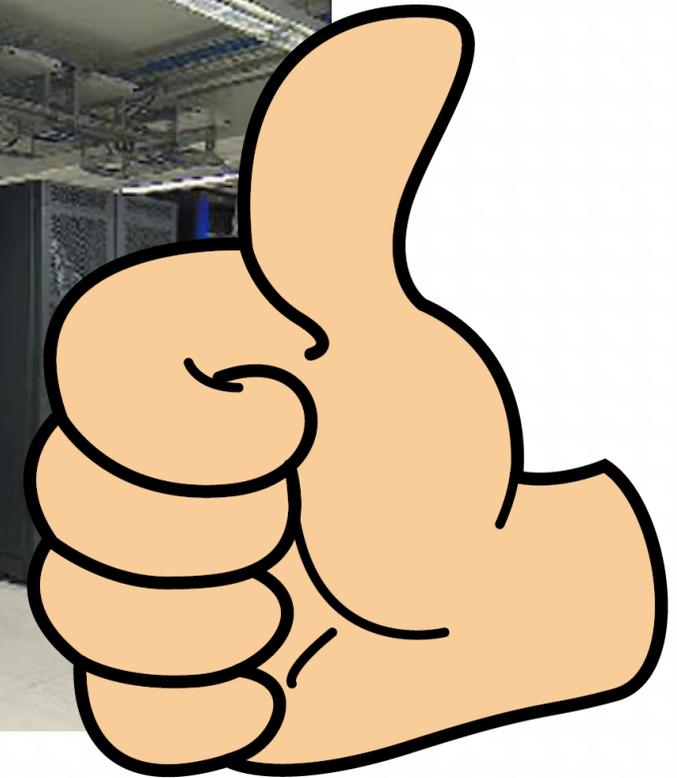
**Wellenfunktion berechnen**



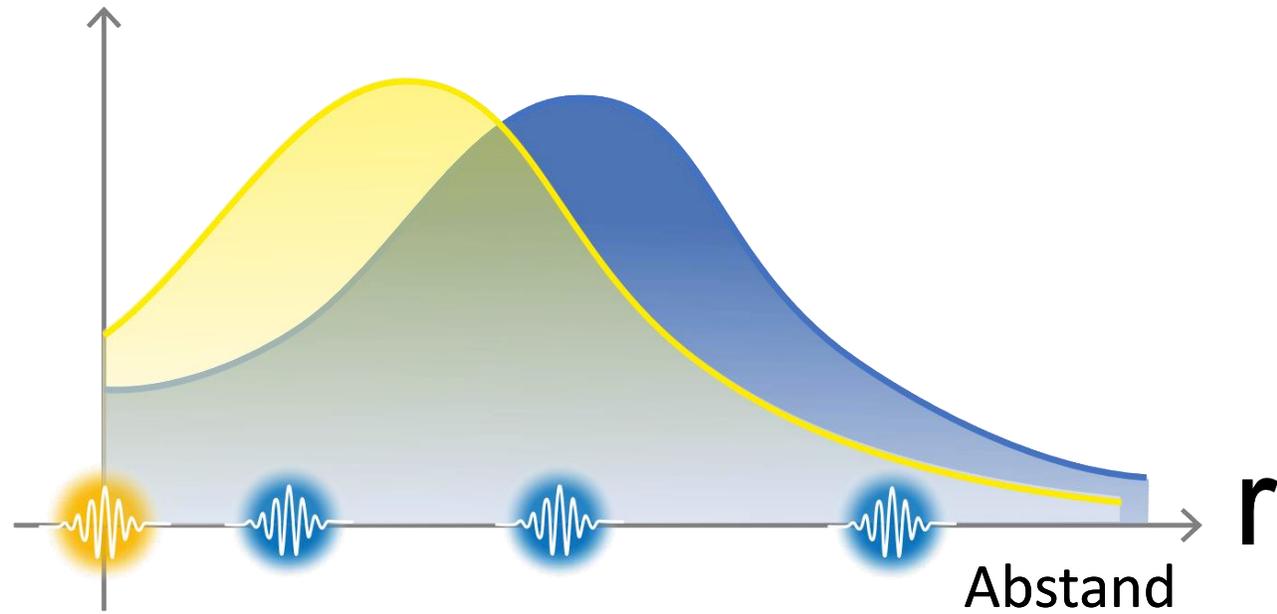
100.000.000.000

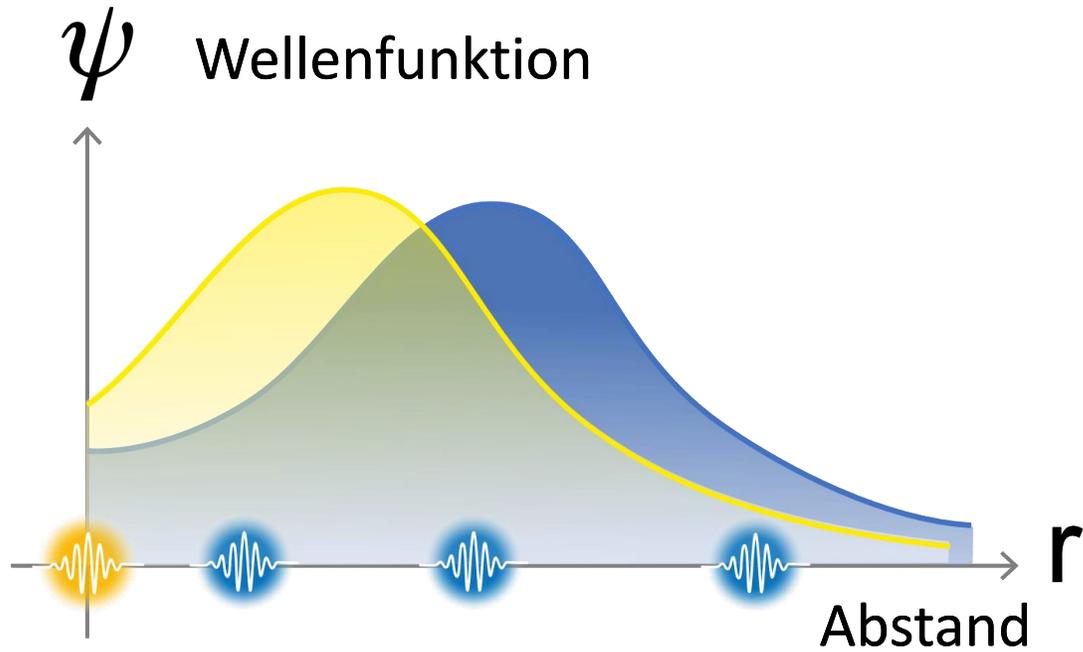


100.000.000.000

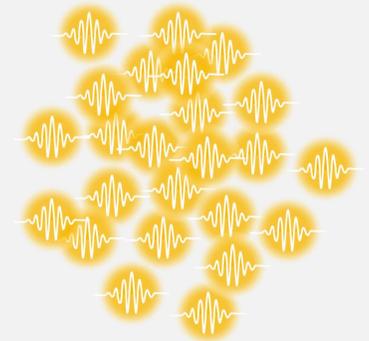


$\psi$  Wellenfunktion

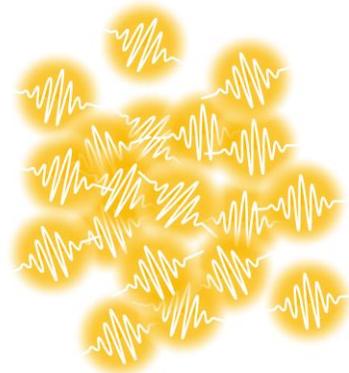
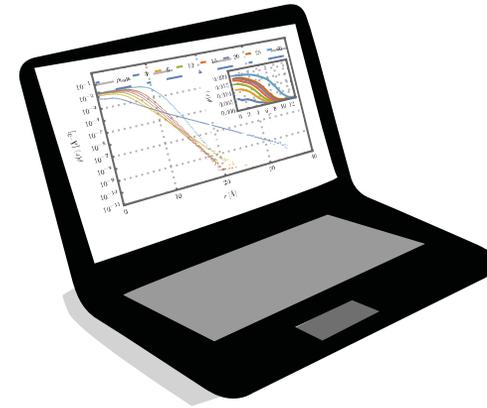
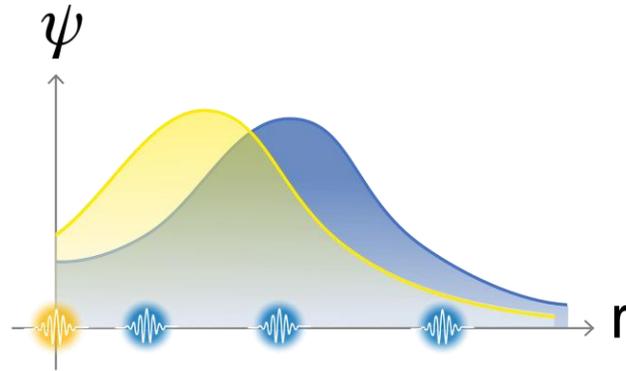
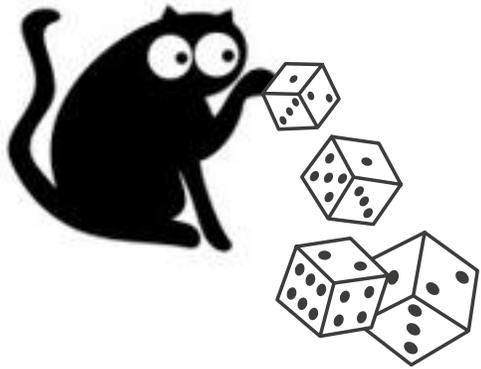




- Anordnungen „zufällig“ erzeugen
- besseres Verständnis von komplexen **Vielteilchensystemen**
- neue Technologien wie der **Quantencomputer**
- **es macht Spaß!**



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](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>