在量子力学的发展和原子分子研究中，解决多体问题的薛定谔方程是至关重要的。在过去，有不同的近似方法来解决这个问题：从哈特里-福克理论到构型相互作用。这些方法大多依赖于对波函数的物理近似来解决薛定谔方程。量子蒙特卡罗使用一个试探波函数来建模整个积分空间的采样，从而近似求解多体波函数。在变分量子蒙特卡罗中，薛定谔方程被修改为给出局部能量的积分和概率密度，然后通过Metropolis算法求解。在扩散蒙特卡罗分支中，薛定谔方程被写成一个虚时间的扩散方程，通过在这个时间的高值处取渐近极限来得到解。在这项工作中，从不同的量子蒙特卡罗方法（引用）获得的一些结果与其他方法获得的结果进行了比较。