

Bachelorkontrakt

Problemformulering

Projektet vil omfatte hvordan 1-dimensionelle funktioner approksimeres ved Gaussian Process Regression, samt redegøre for og implementere forskellige søge metoder der kan optimerer denne process. Jeg vil da anvende og implementerer en af disse metoder til søgning efter den optimale struktur for Au^{10} eller lignende, beskrevet med et energiudtryk fra faststoffysikken. Sidst vil jeg rationaliserer og forklarer resultatet af denne søgning, med henblik paa energiudtrykket.

Aktivitetsplan

September

- Undersøge teorien bag GPR
- Bestemme og redegøre for søgemetoderne
- Implementerer søgemetoderne i python
- Teste og undersøge effektiviten af metoderne
- Skrive relevante afsnit

Oktober

- Begynde at læse op på den relevante faststoffysik model.
- Implementerer søgemetoden i AGOX
- Undersøge diverse systemer

November

- Redegøre for resultaterne af søgningen
- Skrive om faststof modellen
- Lave figurer

December

- Skrive selve rapporten

Vejledningsplan

Der er skemalagt vejledning ved Bjørk hver tirsdag kl 15.