

Nr.	Dėstytojas	Tema LT	Tema En	Pastabos
1	Agnė Brilingaitė	Elektromobilio pasiekiamos zonos skaičiavimas	Computation of iso-chrone regions for electric vehicles	<p>augelio dabar naudojamų elektromobilių, ypač pigesnių, akumuliatorių talpa yra ribota. Svarstant ar pirkti elektromobilį, bei pradėjus jį naudoti, neretai minimas taip vadinamas "range anxiety" -- netikrumas ar pakaks energijos nuvažiuoti ten kur reikia. Egzistuojantys servिसai bei informacinės sistemos pačiuose automobiliuose gali pateikti tik gana apytikslę informaciją apie elektromobilio pasiekiamą zoną. Būtų įdomu patyrinėti algoritmus, kurie kaip galima našiau ir tiksliau paskaičiuotų geografinę zoną, kuri yra elektromobilio pasiekiamą per duotą laiką. Tokia zona yra vadinama isochrona. Kaip duomenis būtų galima naudoti duomenis apie esamą ir numatomą eismo situaciją (pvz. iš Google Maps), bei elektromobilio energijos vartojimo modelius. Taip pat būtų galima nagrinėti kaip konstruoti ir palaikyti tokius modelius remiantis realiais konkrečiais elektromobilio eksploataavimo duomenimis. Problema darosi sudėtingesnė, jei dalį laiko galima skirti baterijų krovimuisi prieš išvykstant.</p> <p>Pasirinkus šią temą, bus galimybė įsidarbinti programuotoju projekte "Duomenų valdymas ir algoritmai sumaniam transportui (Daltra)": (https://tinyurl.com/rdmuhct) Kreiptis į Simoną Šaltenį arba Agnę Brilingaitę. S. Šaltenis bus studentės(-o) konsultantas.</p>
2	Agnė Brilingaitė	Transporto maršrutų planavimas dinaminėje aplinkoje: ar naudoti papildomas duomenų struktūras?	Exploration of pre-computation for routing algorithms on highly dynamic transportation networks	<p>Kad paspartinti transporto maršrutų planavimo algoritmus ant didelių žemėlapių, naudojamos įvairios papildomos grafų duomenų struktūros, kurios suskaičiuojamos remiantis kelių žemėlapiu prieš pradėdant vykdyti maršrutų planavimo užklausas. Tokia taktika puikiai veikia, jei žemėlapis, įskaitant atributus susietus su kelių atkarpomis, nekinta. Visgi moderniuose navigacijos servisuose, pvz. Google Maps, minėti atributai pastoviai kinta. Pavyzdžiui, kintant eismui, kinta ir numatytas laikas, kurio reikia, kad pravažiuoti duotą kelio atkarpą. Kintant atributams, reikia pataisyti arba perskaičiuoti ir papildomas duomenų struktūras. Taigi papildomos duomenų struktūros pagreitina užklausas (reduced query latency), bet deja sumažina kiek žemėlapiu duomenų keitimų galima įvykdyti per laiko vienetą (reduced update throughput), kas reiškia mažiau "šviežią" žemėlapi. Pasirinkus modernią grafų duomenų struktūrą, projektas galėtų pastudijuoti balansą tarp šių dviejų prieštaraujančių vienas kitam "quality of service" reikalavimų.</p> <p>Pasirinkus šią temą, bus galimybė įsidarbinti programuotoju projekte "Duomenų valdymas ir algoritmai sumaniam transportui (Daltra)": (https://tinyurl.com/rdmuhct) Kreiptis į Simoną Šaltenį arba Agnę Brilingaitę. S. Šaltenis bus studentės(-o) konsultantas.</p>
3	Agnė Brilingaitė	Transporto maršrutizavimo algoritmų lygiagretinimo strategijos	Parallellization strategies for advanced routing algorithms	<p>Naujos kartos transporto maršrutizavimo algoritmai ant labai dinamiškų transporto žemėlapiu duomenų susiduria su našumo problemomis. Dėl duomenų dinamiškumo, sudėtinga naudoti iš anksto paskaičiuotas grafų duomenų struktūras, kurios įprastai naudojamos pagreitinti maršrutizavimo algoritmus. Kitas būdas pagreitinti tokius algoritmus yra jų lygiagretinimas. Būtų įdomu patyrinėti, kaip geriausiai lygiagretinti tokius algoritmus, išnaudojant šiuolaikinių procesorių ir grafikos procesorių GPU galimybes.</p> <p>Pasirinkus šią temą, bus galimybė įsidarbinti programuotoju projekte "Duomenų valdymas ir algoritmai sumaniam transportui (Daltra)": (https://tinyurl.com/rdmuhct) Kreiptis į Simoną Šaltenį arba Agnę Brilingaitę. S. Šaltenis bus studentės(-o) konsultantas.</p>
4	Aistis Raudys	Vertybinių popierių prekybos sistemų „peroptimizavimo“ efekto tyrimas ir prognozavimas naudojant mašininio mokymosi metodus	Investigation and prediction of the effect of overoptimization of securities trading systems using machine learning methods	VP prekybos sistemos suoptimizuotos naudojant istorinius duomenis realybėje dažnai nuvilia. Reikėtų iširti kokius faktorius ir kiek lemia prekybinių sistemų peroptimizavimą. Tai leistų kurti sistemas kurios ir realybėje prekiauja pelningai.
5	Aistis Raudys	XGBoost medžių ir kitų sprendimo medžių tyrimas	Investigation of XGBoost trees and other decision trees	
6	Aistis Raudys	Akių sekimo technologijų panaudojimas išmaniuose įrenginiuose	Use of eye tracking technologies in smart devices	

7	Aistis Raudys	Dirbtinis intelektas IoT įrenginiuose, neuroniniai tinklai mikrokontroleriuose ir mikrokompiuteriuose	Artificial intelligence in IoT devices, neural network for microcontrollers	Naudojant Arduino ar pan. MC realizuoti DNT ir naudojant sensorius atpažinti aplinka ar objektus, pritaikyti IoT. Tensorflow Light. Iširti kaip geriausia realizuoti neuroninius tinklus MC ir naudojant sensorius atpažinti aplinka ar objektus pritaikyti IoT.
8	Aistis Raudys	Pasikartojimo suradimo algoritmai laiko eilutėse	Finding Repeated Structure in Time Series: Algorithms and Applications	https://www.cs.unm.edu/~mueen/Tutorial/SDM2015Tutorial2.pdf
9	Aistis Raudys	Multikriterinio optimizavimo metodų tyrimas	Research of multicriteria optimization methods	
10	Aistis Raudys	Balso atpažinimas mikrokompiuteriuose	Voice recognition in microcomputers	
11	Aistis Raudys	Balso generavimas mikrokompiuteriuose	Voice generation in microcomputers	
12	Aistis Raudys	Giliųjų neuroninių tinklų priešiškas apmokymas garso atpažinime – kaip apgauti balso atpažinimo sistemas	Hostile training in deep neural networks in voice recognition - how to trick voice recognition systems	
13	Aistis Raudys	Multikriterinis pastiprintas mokymas	Multicriteria reinforcement learning	
14	Aistis Raudys	3D/PointCloud ir Kinect v2 / Intel® RealSense vaizdų atpažinime	3D / PointCloud and Kinect v2 / Intel® RealSense image recognition	
15	Aistis Raudys	Žmonių srauto prognozavimas viešame transporte naudojant DI metodus bei autobusų tvarkaraščio ir dydžio planavimas	People traffic forecasting in public transport using DI methods and bus schedule and size planning	
16	Aistis Raudys	Lietuviško teksto generavimo metodai naudojant generatyvinius neuroninius tinklus.	Lithuanian text generation methods using generative neural networks.	
17	Aistis Raudys	Pastiprinto mokymo (ang. reinforcement learning) ir neuroninių tinklų taikymas vertybinių popierių prekyboje	Application of reinforcement learning and neural networks in securities trading	
18	Aistis Raudys	Interaktyvių reklamų kūrimas naudojant mašininio matymo neuroninius tinklus (OpenCV ir pan.)	Creating interactive advertisements using machine vision neural networks (OpenCV, etc.)	
19	Aistis Raudys	Artimiausių kaimynų metodo tobulinimas optimizuojant atstumo funkciją	Improving the nearest neighbors method by optimizing the distance function	
20	Aistis Raudys	Kelių kalbėtojų atskyrimas įrašant keliais mikrofonais (garso šaltinio trianguliacija). Garso šaltinių atskyrimas iš įrašo - kalbėtojo atskyrimas naudojant DNN ir kitus metodus	Separation of multiple speakers by recording with multiple microphones (triangulation of an audio source).	
21	Aistis Raudys	Realaus laiko aktyvus triukšmo panaikinimas (ang. noise canceling) garso įrašuose ir/arba naudojant kelis mikrofonus naudojant neuroninius tinklus.	Separation of audio sources from a recording - Separation of a speaker using DNN and other methods	
22	Aistis Raudys	Vaizdus generuojantys neuroniniai tinklai	Real-time active noise canceling in audio recordings and / or using multiple microphones using neural networks.	
23	Aistis Raudys	Kalbos kokybės rekonstravimas/gerinimas naudojant dirbtinio intelekto metodus (pvz: 8khz upsamplingas į 44khz, telefoninių pokalbių kokybės pagerinimas).	Reconstruction / improvement of speech quality using artificial intelligence methods (eg: 8khz upsampling to 44khz, improvement of telephone call quality).	
24	Aistis Raudys	Kalbos/raktažodžių atpažinimas mikrokompiuteriuose ir mikrokontroleriuose (kaip kad ok google, alexa).	Language / keyword recognition on microcomputers and microcontrollers (like ok google, alexa).	
25	Aistis Raudys	Kalbą generuojantys neuroniniai tinklai lietuvių kalbai, DeepVoice, WaveNet ir kt. (Neural networks for text to speech application)	Language generating neural networks for Lithuanian, DeepVoice, WaveNet and others. (Neural networks for text to speech application)	Pritaikyti gilius neuroninius tinklus lietuvių kalbos balso generavimui.
26	Aistis Raudys	Kalbą atpažįstantys neuroniniai tinklai lietuvių kalbai, DeepSpeech ir kt.	Speech-recognizing neural networks for the Lithuanian language, DeepSpeech and others.	Pritaikyti gilius neuroninius tinklus lietuvių kalbos balso atpažinimui.

27	Aistis Raudys	FPGA panaudojimas gilias mokymo/finansų optimizavimo/garso atpažinimo uždaviniuose	Use of FPGA in deep learning / financial optimization / sound recognition tasks	
28	Aistis Raudys	Dirbtinis intelektas robotikoje: optimalus variklio valdymas naudojant neuroninius tinklus.	Artificial intelligence in robotics: optimal motor control using neural networks.	
29	Aistis Raudys	K-kaimynų klasifikavimo algoritmo realizavimas ir tobulinamas GPU/CUDA aplinkoje naudojant PyTorch	Implementation and improvement of K-neighbour classification algorithm in GPU / CUDA environment using PyTorch	
30	Aistis Raudys	Lietuvių kalbos rašybos taisydas naudojant gilias mokymo metodus.	Correction of Lithuanian spelling using deep teaching methods.	
31	Aistis Raudys	Skraidančių mirko objektų sekimas	Tracking flying micro objects for destruction.	Naudojant OpenCV optiniame srute surasti skraidantį objektą ir jį sunaikinti.
32	Aistis Raudys	Neuroninių tinklų panaudojimas roboto balansavimui	Development of neural network based self-balancing robot	Naudojant giroskopus sukurti balansuojantį robotą panaudojant neuroninius tinklus ir palyginant su tradiciniais metodais. Šiam tikslui panaudoti coppeliarobotics.com, vėliau realybėje
33	Aistis Raudys	Dirbtinio intelekto metodų panaudojimas autonomiam besimokančiam robotui	Autonomous Self-Learning Robot	Panaudoti roboto sensorių duomenis mokymuisi. Pradžioje virtualioje aplinkoje coppeliarobotics.com, vėliau realybėje.
34	Aistis Raudys	Neuroninių tinklų panaudojimas roboto rankos judėjimo kelio optimizavimui.	Use of neural networks to optimize the path of robot arm movement.	Palyginti neuroninių tinklų ir kitus metodus roboto rankos kelio optimizavimui. Pradžioje coppeliarobotics.com aplinkoje vėliau realybėje.
35	Aistis Raudys	Optimizavimo algoritmų pritaikymas prekybinėms sistemoms kriterijų pakeičiant pelnu arba Sharpe santykiu	Application of optimization algorithms for trading systems, replacing the criterion with a profit or Sharpe ratio	Kainų matrica pritaikyta simuliuoti profit arba sharpe kriterijų
36	Andrius Vytautas Misiukas Misiūnas	MTD/MBD temą "EEG signalų analizė"	EEG signal analysis	
37	Gintautas Dzemyda	Geometrinio Daugiamačių skalių metodo, skirto daugiamačiams duomenims vizualizuoti, tyrimas	Investigation of the Geometric multidimensional scaling for multidimensional data visualization	Eksperimentinis metodo tyrimas, siekiant kuo geresnės duomenų vizualizavimo kokybės
38	Gintautas Dzemyda	Kepenų radiologinių vaizdų analizė siekiant nustatyti vėžio pažeistą vietą	Analysis of radiological images of the liver to identify the site of cancer	Vaizdų analizės uždavinys
39	Gintautas Dzemyda	Duomenų klasifikatorių efektyvumo priklausomybės nuo besikeičiančios mokymo imties tyrimas	A study of the dependence of the efficiency of data classifiers on a changing training sample	Reikės patyrinėti kelis klasikinius duomenų klasifikatorius
40	Gintautas Dzemyda	Geometrinio daugiamačių skalių metodo daugiaekstremiškumo tyrimas	A study of multiextremality of the geometric multidimensional scaling	Eksperimentinis metodo tyrimas, siekiant įvertinti optimizuojamos funkcijos daugiaekstremiškumą.
41	Joana Katina	Prognozavimo metodų analizė	Analysis of forecasting methods	Temos pavadinimą galima patikslinti priklausomai nuo to, kokie duomenys bus naudojami, bet čia suderintume su pačiu studentu asmeniškai.
42	Julius Žilinskas	Pusiau teigiamai apibrėžtas optimizavimas	Semidefinite programming	
43	Julius Žilinskas	Kalnų kelionių technikos trasų įveikimo modeliavimas ir optimizavimas	Imitation and optimization of accomplishment of mountaineering routes	
44	Linas Bukauskas	Sentimentų analizės metodų tyrimai	Investigation of sentiment analysis methods	Darbas atliekamas kibernetinio saugumo laboratorijoje.
45	Linas Bukauskas	Klasifikavimo metodų tyrimai kibernetinio saugumo kontekste	Research of Classification methods in cybersecurity	Darbas atliekamas kibernetinio saugumo laboratorijoje.
46	Linas Laibinis	Paskirstytų, gedimams atsparių, dinamiškai konfiguruojamų programų sistemų formalus modeliavimas ir verifikavimas	Formal modelling and verification of distributed, fault tolerant, dynamically reconfigurable software-based systems	Darbo metu yra sukuriama pasirinktos paskirstytos programinės sistemos formalus modelis (remiantis jos aprašymu ar reikalavimų sąrašu). Sukurtas modelis yra analizuojamas ir verifikuojamas, naudojantis automatinio įrodymo ar modelių patikrinimo įrankiais. Atsparumas gedimams ir galimybė dinamiškai konfiguruoti tokias sistemas priklausomai nuo besikeičiančios aplinkos yra esminės savybės, į kurias fokusuojamasi verifikavimo metu.

47	Linās Laibinis	Sistemų prototipų kūrimas ir skaitinis įvertinimas naudojant diskretinių įvykių simulavimo metodus	System prototyping and quantitative assessment by discrete event simulation techniques	Diskretinių įvykių simulavimo aplinkos leidžia sukurti būsimos paskirstytos sistemos prototipą, aprašyti joje vykstančius įvykius, komunikacijas tarp komponentų, galimus gedimus ir modeliuoti laiko pauzes. Darbo metu sukurtos sistemos prototipo simulavimas duotų galimybę skaitiškai įvertinti sistemos darbo charakteristikas (efektyvumą, patikimumą ir t.t.) bei tuo pačiu palyginti skirtingas tokių sistemų konfigūracijas.
48	Linās Laibinis	Paskirstytų sistemų modeliavimas ir verifikavimas remiantis statistinio modelių patikrinimo metodais	Modelling and verification of distributed systems using statistical model checking methods	Darbo metu sukurtas paskirstytos sistemos modelis (prototipas) yra analizuojamas statistinio modelių patikrinimo metodais (pvz., naudojantis automatizuota aplinka Uppaal). Analizės rezultatas yra statistinis ar tikimybinis suformuluotų sistemos savybių (efektyvumo, patikimumo ir t.t.) ar jos skaitinių apribojimų įvertinimas bei grafinis pateikimas.
49	Linās Laibinis	Paskirstytų programinių sistemų kūrimas ir skaitinis įvertinimas naudojantis komunikavimo šablonais	Design and quantitative evaluation of distributed software-based systems using communication patterns	Darbo metu yra skaitiškai įvertinami paskirstytų sistemų kūrimo naudojami komunikavimų šablonai ir jų kompozicijos. Identifikuojami sistemos ar šablonų parametrai, tiesiogiai įtakojantys sistemos darbą, ir jų optimalumas yra analizuojamas naudojantis statistinio ar įprasto modelių patikrinimo metodais.
50	Linās Laibinis	Automatizuotos matematinio įrodymo ir sistemų verifikavimo aplinkos	Automated environments for mathematical proof and system verification	Darbo palyginamos plačiai naudojamos automatizuotos matematinio įrodymo ir sistemų verifikavimo aplinkos. Analizės metu yra fokusuojamasi į esamas automatinio įrodymo priemones ir jų plėtimo galimybes bei galimybę integruoti skirtingus verifikavimo įrankius vieno projekto ribose.
51	Linās Litvinas	Dirbtiniai neuroniniai tinklai laiko eilutėms	Artificial neural networks for time series	
52	Linās Litvinas	Biojutiklio daugiakriterinis optimizavimas	Multiobjective optimization of biosensor	
53	Pijus Kasparaitis	Lietuvių kalbos sintezė naudojant neuroninius tinklus	Text-to-speech synthesis of Lithuanian based on neural networks	Dėstytoji dėl temos rašyti šiuo e-pašto adresu: pkasparaitis@yahoo.com
54	Rimantas Vaicekuskas	Pamaininio darbo tvarkaraščio optimizavimo algoritmų lygiagrečius įgyvendinimas	Parallel implementation of shift scheduling optimization algorithms	
55	Rimantas Vaicekuskas	Pamaininio darbo tvarkaraščio optimizavimo algoritmai	Shift scheduling optimization algorithms	
56	Saulius Gražulis	Gardelės parametrų išgavimas iš žmogui skirtų tekstų ir COD apžvalginės DB kūrimas	Extracting Unit cell parameters of crystals from human-readable scientific papers	Deja, kol kas ne visuose straipsniuose paskelbtos kristalų struktūros yra atvirai aprašytos viešai prieinamais duomenimis. Daugeliui tokių „paslėptų“ struktūrų straipsniuose nurodomi pagrindiniai kristalo parametrai – gardelės konstantos, simetrijos grupė, molekulės cheminė formulė ir pavadinimas. Tai, nors ir nepilni, bet vis viena labai vertingi duomenys, nes leidžia preliminariai identifikuoti kristalinę medžiagą. Kursiniame darbe bus pasiūlyta surinkti visų publikuotų kristalų struktūrų bibliografijas ir pagal atvirai prieinamus straipsnių tekstus arba santraukas (abstracts), naudojant paprastą Perl reguliarias išraiškas (o vėliau gal būtų sudėtingesnę lingvistinę analizę) automatiškai išgauti kiekviename straipsnyje publikuotų medžiagų kristalų parametrus.
57	Saulius Gražulis	Naršyklės įskiepis kristalografinei informacijai rinkti	Browser plugin for collection of scientific information	Šiuolaikiniame mokslo pasaulyje labai didelė informacijos dalis yra išbarstyta po daugybę teksto puslapių (mokslinių straipsnių, disertacijų, monografijų), ir jų sisteminga paieška kompiuterinėmis priemonėmis yra labai apsunkinta. Deja, automatinė tekstų analizė ne visada sugeba teisingai išgauti reikiamus duomenis, ir tenka įdėti daug žmogaus rankų darbo, įvedant informaciją į kompiuterizuotas duomenų bazes. Siūloma sukurti įrankį, kuris palengvintų tyrėjams informacijos surinkimą ir kaupimą vienoje gerai struktūruotoje duomenų bazėje. Siūlomas darbas būtų skirtas įskiepiui, kuris padeda rinkti kristalografines ir chemines informacijas, sukurti. Tai leistų šimtam tyrėjui vienu metu visame pasaulyje rinkti informaciją, dėti ją į bendrą duomenų bazę ir po to bendrai naudotis surinktais duomenimis. Toks modelis jau neblogai pasiteisino renkant citavimo ir bibliografinius duomenis; naudinga būtų pritaikyti jį kitoms mokslo duomenų rūšims.
58	Saulius Gražulis	Mažų molekulių, randamų COD DB, susiejimas su PDB	Linking the Crystallography Open Database (COD) with the Protein Data Bank (PDB)	COD duomenų bazėje sukaupta virš 450000 įrašų apie mažų molekulių kristalų struktūras. Apie 2/3 jų yra organinės molekulės. Dalis tų molekulių yra ligandai, kofaktoriai ar vaistai, galintys jungtis su baltymų molekulėmis, o šių baltymų struktūros gali būti randamos PDB duomenų bazėje. Darbo metu bus pasiūlyta surasti tas molekules COD duomenų bazėje, kurios yra chemiškai tokios pačios, kaip ir PDB archyve rasti ligandai, ir susieti COD su PDB, naudojant PDB papildomos informacijos pateikimo JSON schemą.

59	Saulius Gražulis	Saugumo auditas COD ir panašiose interneto svetainėse	Security audit in the Crystallography Open Database and related Web sites.	Žiniatinklis (World Wide Web) buvo sukurtas tam, kad įgalintų mokslininkus greitai ir patogiai keistis tyrimų rezultatais bei kita informacija. Nujos žiniatinklio priemonės leidžia ne tik parsisiųsti informaciją iš nutolusių svetainės, bet ir interaktyviai pateikti informaciją šioms svetainėms arba paleisti procesus nutolusiose serveriuose. Deja, šios galimybės atveria eilę saugumo spragų – serveriai gali būti panaudojami ne taip ir ne tam, kam jie buvo sukurti, ir tai gali atsitikti be svetainės kūrėjo žinios. Šiame darbe, naudojant įvairius svetainių audito įrankius (e.g Kali Linux), bus pasiūlyta patikrinti įvairių mokslo duomenims skirtų interneto svetainių (COD, RestfulDB, Web Scriptlets) saugumą; kitaip tariant, pabandyti „nulaūžti“ ;) programinę įrangą, kurios pagrindu veikia šios svetainės, ir pasiūlyti, kaip galima nuo išnagrintų gėsmių apsisaugoti.
60	Saulius Gražulis	Teisingumo įrodymų palaikymas daugiaparaadigminėje programavimo kalboje Starta	Integrating correctness proofs into multi-paradagim programming language Starta.	Šiuolaikiniai aukšto lygio programavimo kalbų kompiliatoriai stebimai padidino programuotojų darbo efektyvumą, palyginus su autokodais ar asemblerio kalbomis. Deja, nuo to laiko nauja "magiška kulka", leidžianti pasiekti dar didesnių darbo našumų ar aukštesnės programų kokybės, taip ir nėra atrasta. Vienas iš stebėtinų dabartinių kompiliatorių trūkumų -- visiškai atotrūkis tarp teorinių darbų, skirtų programų teisingumo įrodymams, ir praktiniam programavimui naudojamų programavimo kalbų bei kompiliatorių. Darbo eigoje bus siūloma realizuoti automatinę sistemą teiginiams apie programą įrodyti, integruotą į aukšto lygio programavimo kalbos kompiliatorių. Pirmame etape planuojama naudoti specialiai tam tikslui sukurtą programavimo kalbą ir kompiliatorių, kuriuos, reikalui esant, galima keisti, siekiant supaprastinti įrodymų išvedimą; tačiau sistema turėtų būti pakankamai moduliarizuota, kad įrodymų posistemę galima būtų perkelti į kitų kalbų (Java, C, C++, C#, Perl, Python, etc.) kompiliatorius.
61	Saulius Gražulis	Mažų molekulių kristalų kontaktų paviršiai	Contact surfaces in small molecule crystals	Siūloma peržvelgti visas COD organinių kristalų struktūras, visų pirma tas, kuriuose yra vaistinių medžiagų molekules ar į jas panašios molekules. Surasti šių molekulių kontaktus su *savo pačių* kristalais, aprašyti šių kontaktų paviršius. Surasti tas molekules, kurių kompleksai su baltymais patalpinti PDB archyve. Palyginti mažos molekules kristalo ir baltymo kontaktinius paviršius; nustatyti, ar pagal šių paviršių panašumą galima prognozuoti susirišimą su baltymu.
62	Saulius Gražulis	Paskirstytos, patikimos ir atsparios trikdžiams bei padalinimams COD duomenų bazės kūrimas.	Creating reliable and fault-tolerant server system for Crystallography Open Database	Šiuo metu COD duomenų bazė, organizuota kaip centrinis (angl. "master") serveris, kurio duomenis patikimumo dėlei replikuoja visa eilė antrinių (angl. "mirror") kompiuterių. Tokia sistema, deja, neužtikrina nenutrūkstamo sistemos darbo, centriniams serveriui išėjus iš rikiuotės ar nutrūkus ryšiai tarp centrinio serverio ir interneto. Darbo metu bus siūloma realizuoti paskirstytą, lygių serverių mainais (angl. "peer-to-peer") paremtą sistemą, atsparią sistemos padalinimui, užtikrinančią duomenų neprieštarinumą (consistency) ir minimizuojančią sistemos prastovas. Nors CAP teorema teigia, kad visų trijų tikslų (neprieštarinumo, prieinamumo ir atsparumo padalinimams) vienu metu pasiekti neįmanoma, bus bandoma surasti inžinerinius sprendimus, leidžiančius minimizuoti praradimus (prastovas, duomenų praradimą ir pan.), atsiradusius dėl to, kad COD bus realizuota kaip paskirstyta duomenų bazė. Darbo metu reikės išnagrinti įvairius galimus sistemos variantus, įvertinant įvairius kompromisus (prieinamumas/neprieštarinumas, prieinamumas/patikimumas ir pan.).
63	Saulius Gražulis	Didelės apimties duomenų archyvavimas paskirstytoje duomenų saugykloje	Archiving high volume scientific data in a distributed peer-to-peer repository	Naujausias IUCr (Tarptautinės kristalografų sąjungos, angl. International Union of Crystallography) rekomendacijos siūlo archyvuoti visus pradinis duomenis, panaudotus struktūros nustatymui, įskaitant difrakcijos (išsklaidytų Rentgeno spindulių) vaizdus, užregistruotus monokristalinių difraktometrų. Šios rekomendacijos įgyvendinimas kelia naujus iššūkius -- bus reikalingas gerokai didesnis pastovios atminties (diskų, juostų) kiekis, negu naudotas iki šiol, ir duomenys turi būti prieinami bent jau ateinančius dešimtmečius, t.y. pergyventi kelias kompiuterinės įrangos kartas. Visa tai susiję su papildomomis sąnaudomis ir duomenų laikymo kaštais. Vienas iš galimų šių problemų sprendimo būdų -- panaudoti paskirstytą, daugelio institucijų ir/arba individų palaikomą duomenų archyvavimo sistemą, turinčią pakankamą duomenų perteklumą, užtikrinantį patikimą sistemos darbą ilgą laiką. Tokios sistemos prototipas buvo išbandytas 2018 m. studentų bakalauro darbų metu. Darbo metu bus siūloma realizuoti veikiančią, mokslininkams tinkamą sistemą Tahoe-LAFS ir/arba IPFS pagrindu.

64	Saulius Gražulis	Vidutinių trimačių simetrijos grupių apskaičiavimas iš keturmačių moduluotų struktūrų simetrijos operatorių.	Computing average space groups from 4D and higher-dimensional space group operators	Pastaruoju metu daugėja informacijos apie medžiagos būvį, kuris, nors ir turi daugumą kristalo savybių (pvz., sklaido Rentgeno spindulius siaurais koncertuotais atspindžiais), nėra tikras kristalas, nes negali turėti periodinės gardelės, suderinamos su stebima objekto ar sklaidymo vaizdo simetrija, tokia kaip penkto laipsnio simetrijos ašis. Tai -- kvazikristalai (http://en.wikipedia.org/wiki/Quasicrystals) ir (ne)endramatės moduluotos struktūros. Šioms struktūroms aprašyti kuriamas matematinis aparatas, panaudojantis simetrijos grupių teoriją. Pasirodo, kad neperiodines trimates struktūras galima aprašyti kaip periodinių struktūrų daugiamatėse erdvėse pjūvius. Pavyzdžiui, kai kurias moduluotas struktūras galima nagrinėti kaip periodinių 4-mačių gardelių pjūvius. Perėjimas į aukštesnių matavimų erdves leidžia panaudoti jau žinomą erdvių simetrijos grupių mat. aparatą, ir kompaktiškai aprašyti neperiodines struktūras. Darbo metu bus siūloma sukurti programinę įrangą, kuri tikrintų keturmačių simetrijos grupių aprašymus, pagal šiuos aprašymus sukurtų vidutinius nedomuluotas trimates simetrijos grupės aprašus, ir integruoti šiuos algoritmus į duomenų bazę COD, kad būtų galima efektyviai kaupti ir tvarkyti neperiodinių medžiagos pavyzdžių aprašymus.
65	Saulius Gražulis	BOINC serverio ir klientų parengimas statistiniams skaičiavimams ir jų pritraukimas COD duomenų bazės analizei	Creating BOINC clients and setting up BOINC server for large volume data analysis in the COD	Statistiniai skaičiavimai, paremti Bajeso statistikos principais, duoda universalią ir koherentišką skaičiavimo metodiką, bet reikalauja itin daug skaičiavimo resursų. Vienas iš būdų tokius resursus surinkti -- panaudoti masinį paralelizmą „savanorių skaičiuotojų“ (angl. "volunteer computing") pateiktuose kompiuteriuose. Šiuo principu yra paremta Berklio universiteto BOINC sistema. Darbo metu bus siūloma: a) paleisti BOINC sistemos serverį; b) parašyti paprasčiausius BOINC klientus; c) parašyti klientus, skirtus COD atstumų ir jungčių parametru tikimybių pasiskirstymų pasiskirstymų radimui ir atnaujinimui, naudojant Bajeso statistikos metodus, ir skaičiavimų organizavimas.
66	Saulius Gražulis	Taisyklėmis paremtos ekspertinės sistemos sukūrimas COD esančių atomų cheminiams tipams nustatyti	Rule-based expert system for deriving chemical properties from crystal structures	Siūloma paversti molekulių aprašymus Prolog duomenų baze ir užkoduoti chemines žinias taip, kad būtų galima automatiškai gauti išvadas apie molekulių ir jose sujungtų atomų savybes (hibridizaciją, geometriją, dalinius ir formalius krūvius, reagingumą).
67	Saulius Gražulis	Molekulinių mazgų ir sankabų analizė COD duomenų bazėje	Finding molecular knots in the Crystallography Open Database	Molekulių kovalentiniai ryšiai gali būti traktuojami kaip tvirti strypeliai, jungiantys atomus (briaunos, jungiančios grafo viršūnes). Jei tokiame molekuliniam grafe yra ciklai, jie gali sudaryti mazgus arba sankabas (pavyzdžiui, sukabintus žiedus, Boromėjaus žiedus ar sudėtingesnes topologines struktūras). Kol kas nėra efektyvių programų, kurios leistų aptikti ir suklasifikuoti tokias struktūras, aptiktas molekulinioose medžiagos kristaluose. Darbo metu bus siūloma sukurti programą, generuojančias 3D grafo aprašymą pagal kristalografines informacijos CIF failus su kristalų struktūromis, pritaikyti šias programas Crystallography Open Database (COD, https://www.crystallography.net/) duomenų bazei, sugeneruoti iš gauto molekulinio grafo mazgo aprašymą, ir pagal mazgo aprašymą pritaikyti įvairius mazgo invariantus skaičiuojančius algoritmus. Darbo pabaigoje sukursime aptiktų mazgų duomenų bazę.
68	Saulius Gražulis	Kvantinės mechanikos metodų pritaikymas kristalografinių duomenų validavimui	Validating experimental crystallographic data using first-principles quantum mechanics	Darbo metu bus siūloma pritaikyti kelias atviro kodo kvantinės mechanikos programas (Abinit, Quantum Espresso) atviro kristalografines duomenų bazės Crystallography Open Database (COD, https://www.crystallography.net/) duomenims patikrinti ir galimoms eksperimento ar duomenų tvarkymo klaidoms aptikti.
69	Saulius Gražulis	DNT ir mašinių mokymo pritaikymas kristalų savybėms prognozuoti	Applying ANN and machine learning for crystal property prediction	Nauji Dirbtinių neuroninių tinklų (DNT) ir mašinių mokymo algoritmai leidžia aptikti dėsningumus ir atpažinti bruožus didelėse duomenų masyvuose, kurie seniau buvo neprieinami išsamiai analizei. Atviroje kristalografinėje duomenų bazėje Crystallography Open Database (COD, https://www.crystallography.net/) yra sukaupta virš 450 tūkst įrašų apie kristalų struktūras, o susieti straipsniai talpina informaciją apie šių kristalų savybes. Darbo metu bus siūloma panaudoti COD DB duomenų imtį DNT ar mašinių mokymo sistemai apmokyti, siekiant prognozuoti įvairias kristalo savybes (pvz. kristalo elementaraus narvelio tūrį, lydymosi temperatūrą ir pan.). Gauti tinklai gali būti naudojami COD ir kitų publikuotų duomenų validavimui, naujų kristalų savybių nustatymui.
70	Saulius Gražulis	Interaktyvios COD recenzavimo svetainės kūrimas	Interactive collaboration platform for the Crystallography Open Database	Interaktyvios programų archyvų svetainės, tokios kaip GitLab, GitGub ar BitBucket, gerai užsirekomendavo programinės įrangos kūrimo procese. Darbo metu bus siūloma pritaikyti analogiškus programų kūrimo įrankius mokslui duomenims tvarkyti. Atvira kristalografinė duomenų bazė Crystallography Open Database (COD, https://www.crystallography.net/) sėkmingai naudoja Subversijos versijų kontrolės sistemą duomenims versijuoti ir kaupti. Natūralu panaudoti sistemą, analogišką aukščiau minėtoms priemonėms, pvz. Redmine, kuri leistų kristalografams aptarinėti ir taisyti kristalų struktūrų duomenis, panašiai kaip programuotojai aptarinėja ir taiso programas. Darbo metu reikės sukurti COD ir Redmine svetainių sąsają ir išbandyti kristalografinių duomenų valdymo srautą realaus gyvenimo sąlygomis.

71	Saulius Gražulis	COD P1 narvelių skaičiavimas	Computing chemical structures in P1 cell for the Crystallography Open Database	Kristalografiniai duomenų failai pateikia minimalų parametrų rinkinį, būtiną kristalo struktūrai atstatyti naudojant kristalo simetrijos grupės operatorius. Toks aprašymas dažnai nepateikia visos chemikų tikslams reikalingos informacijos; pavyzdžiui, kristale molekulė gali būti aprašyta, nurodant tik jos dalį, o likusi dalis turi būti suskaičiuota, pritaikant informaciją apie simetriją. Toks atvaizdavimo būdas chemikams yra nepatogus ir sukelia sunkumų tolimesnėje duomenų analizėje. Darbe bus siūloma pagaminti iš COD duomenų bazę su pilna informacija apie kristalų elementarius narvelius, t.y. sugeneruojant visus atomus, kurių reikia, norint aprašyti kristalo struktūrą tik elementarių transliacijų pagalba (taip vadinamus P1 narvelius). Šioje duomenų bazėje galima atlikti tolimesnę analizę, pavyzdžiui optinių izomerų paiešką.
72	Saulius Gražulis	Srautinio CIF parserio (sintaksinio analizatoriaus) sukūrimas	Creating a streaming CIF parser	DOM modelį, t.y. visas failas perskaitomas į atmintį ir tada apdorojamas. Toks metodas visiškai netinka dideliems konkatenuotiems CIF srautams skaityti, pvz. visiems PDB arba COD duomenų bazių įrašams Unix konvejeryje apdoroti. Siūloma sukurti jau esamo cod-tools sintaksinio analizatoriaus pagrindu (C/Bison) srautinį analizatorių, t.y. tokį analizatorių, kuris perskaitytų ir grąžintų failo informaciją po vieną įrašą, ir leistų kreiptis į save daug kartų, pratęsiant sintaksinę analizę nuo tos failo vietos, kurioje buvo sustojęs.
73	Saulius Gražulis	Kokybiško CIF parserio (sintaksinio analizatoriaus) sukūrimas Java ir C# (.NET) platformoms	High quality CIF parser for Java and .NET platforms	CIF (Crystallography Interchange Format) yra paplitęs strukturuotas duomenų formatas kristalogramų duomenų archyvavimui ir mainams. Yra parašyti kokybiški sintaksiniai šio formato analizatoriai C, Perl ir Python kalbomis. Deja, Java ir .NET aplinkoms šie analizatoriai nėra labai tinkami, nes minėtos platformos
74	Saulius Grigaitis	Blokų grandinių technologijų "įrodymo turtu" protokolai	Blockchain Proof-of-Stake Protocols	Ištirti "įrodymo turtu" (angl. Proof of Stake) protokolus, fokusuojantis į naujausius pasiekimus Ethereum 2.0 "įrodymo turtu" protokole. Pasiūlyti patobulinimus ir juos eksperimentiškai iširti. (Research Proof-of-Stake protocols focusing on the latest achievements in Ethereum 2.0 Proof-of-Stake protocol. Propose protocol improvements and conduct experiments.)
75	Saulius Grigaitis	Privatumą saugančios išmaniosios sutartys blokų grandinių technologijose	Blockchain Privacy Preserving Smart Contracts	Ištirti privatumą saugančius algoritmus, tinkančius apsaugoti išmaniųjų sutarčių privatumą blokų grandinių technologijose. Tyrimas fokusuosis į naujausius pasiekimus homomorfiniame šifravime ir jų pritaikymą saugoti išmaniųjų sutarčių privatumą vykdamas naujos kartos vykdymo aplikose, tokiose kaip EWASM. (Research privacy preserving algorithms suitable for blockchain smart contracts. This research should focus on latest achievements in homomorphic encryption and applying it to preserve privacy of smart contracts on the latest generation execution environments such as EWASM).
76	Severinas Zubė	Topologinė duomenų analizė	Topological data analysis	
77	Severinas Zubė	Kieto kūno judėjimo modeliavimas erdvėje	Modeling of solid body motion in space	
78	Tadas Meškauskas	Automatizuoti biologinių membranų defektų atpažinimo algoritmai atominės jėgos mikroskopo nuotraukose	Automatic algorithms for detection of defects in atomic force microscopy images	
79	Tadas Meškauskas	Automatizuotos medicininių signalų analizės algoritmai	Algorithms for Automatic Analysis of Clinical Signals	
80	Tadas Meškauskas	Algoritimų triukšmui šalinti duomenyse analizė	Analysis of Algorithms for Data Denoising	
81	Tadas Meškauskas	Signalų atpažinimo ir prognozavimo algoritmai	Recognition and Forecasting Algorithms for Signals	
82	Tadas Meškauskas	Baigtinių elementų metodai kompiuteriniam procesų vykstančių biologinėse membranose modeliavimui	Finite element methods for computer modelling of processes in biological membranes	