

VU Matematikos ir informatikos fakultetas / VU Mathematics and Informatics Faculty

Kompiuterinio modeliavimo magistro studijų programos / Study program: Computer Modelling

Mokslo tiriamojo darbo projekto temų sąrašas 2023-2024 m. / The List of Scientific Research Project for 2023- 2024

Nr.	Dėstytojas / Supervisor	Tema lietuvių kalba / Title in Lithuanian	Tema anglų kalba / Title in English	Aprašymas
1	Agnė Brilingaitė	Algoritmų taikymo atliekant skaitmeninius nusikaltimus tyrimas	Research of Algorithm Application in Digital Forensics	Darbas atliekamas kibernetinio saugumo laboratorijoje. Tiriamų algoritmų grupė pasirenkama; darbo tikslas - ištirti, pritaikyti, patobulinti įrankius
2	Aistis Raudys	Space colonisation ir kitokių algoritmų tyrimai ir kūrimas	Research and development of space colonization and other growth simulation algorithms	Sukurti pitono biblioteką skirtą įvairių meninių algoritmų naudojimui
3	Aistis Raudys	Visuomenės simuliacijos neurniniais tinklais	Simulating society with neural networks	Sukurti daug paprastų neroninių tinklų kaip visuomenę ir bandyti simuliuoti skirtingus pokyčius joje
4	Aistis Raudys	Slenkančių vidurkių tyrimas finansinių laiko eilučių prognozavimui	Exploring moving averages for forecasting financial time series	Momentum, kainai ir volatilumui galima rasti skirtingus slenkančių vidurkių profilius. Juos reikia ištirti.
5	Aistis Raudys	Matematinų grafikų aprašymų generavimas naudojant gilius neuroninius tinklus	Generating mathematical graph descriptions using deep neural networks.	Ištirti ar galima sukurti algoritmą kurs akliesiems apipaskotų matematinį grafiką
6	Aistis Raudys	Balso sintezatoriai - registras, tembras, prozodija (išraiškingumas), tempas, garsumas	Register, Timbre, Prosody, Pace, Volume in TTS	Kaip sintezuoti balsą skirtingiems poreikiams keičiant jo charakteristiką
7	Aistis Raudys	Intonacija kalbą generuojančiuose neuroniniuose tinkluose (DeepVoice, WaveNet, VITS ir kt.)	Changing tone in language generating neural networks (DeepVoice, WaveNet, VITS, etc)	Pritaikyti gilius neuroninius tinklus lietuvių kalbos balso generavimui su skirtinga intonacija
8	Aistis Raudys	Spiečių robotika – consensus algoritmus	Swarm robotics - consensus algorithms	Ištirti spiečių robotika ir consensus algoritmus
9	Aistis Raudys	Binariniai neuroniniai tinklai	Binary Neural Network	Ištirti binarinius neuroninius tinklus
10	Aistis Raudys	Neuroninio tinklo mokymas kirčiuoti homografus	Neural network for stressing Lithuanian words.	Homografai – žodžiai kurie rašosi vienodai bet tariasi skirtingai. Apmokyti neuroninį tinklą aptikti tokius žodžius ir juos sukirčiuoti – tai neišspręsta mokslinė problema
11	Aistis Raudys	Spygliuoti neuroniniai tinklai (SNN)	Spiking neural networks (SNNs)	Ištirti kaip SNN gali būti naudojami vaizdų ar garso atpažinime ar kitose srityse.
12	Aistis Raudys	Neuroninių tinklų mažinimas tam kad juos galima būtų paleisti ant MCU	Research how to shrink (8 bit 4 bit weights) neural networks so they can fit in MCU memory	Ištirti quanzation ir pan. algoritmus tam kad sumažinti ir pagreitinti neuroninis tinklus.
13	Aistis Raudys	PID ir neuroniniais tinklais paremtų kontrolerių tyrimas	Investigation of PID and neural network based controllers	PID kontroleriai naudojami industrijoje procesams valdyti. Būtų įdomu palyginti neuroninius tinklus ir PID kontrolerius šiai užduočiai
14	Aistis Raudys	Nuspėjami techninės priežiūros tyrimai	Predictive maintenance research	Kaip nuspėti kada suges techninė įranga pagal vibracijas garsą ar kitas charakteristikas
15	Aistis Raudys	Progresyvi priežiūra: Ultragarso ir vibracijų analizė naudojant mašininio mokymo metodus	Progressive maintenance: ultrasonic and vibration analysis using machine training methods	Kaip nuspėti kada suges techninė įranga pagal vibracijas garsą ar kitas charakteristikas
16	Aistis Raudys	Saulės elektrinių dienos energijos prognozavimas pagal orų prognozių duomenis	Daily energy forecasting of solar power plants based on weather forecast data	Prognozuoti kiek saulės elektrinė pagamins 1 val. į priekį.

17	Aistis Raudys	Miškų tipų, kirtimų ir kt. faktorių nustatymas iš satelitinių ir drono nuotraukų	Forest types, fellings, etc. determination of factors from satellite and drone images	Ištirti ar galima naudoti kosmoso nuotraukas miškų kirtimams identifikuoti
18	Aistis Raudys	Carry out the counting of people in public transport from security cameras in order to optimize bus sizes	Ištirti metodus kurie leidžia skaičiuoti žmonių kiekius nuotraukose ar video	
19	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 ištirti kokie faktoriai ir kiek lemia prekybinių sistemų peroptimizavimą. Tai leistų kurti sistemas kurios ir realybėje prekiauja pelningai.
20	Aistis Raudys	Interaktyvių reklamų kūrimas naudojant mašininio matymo neuroninius tinklus (OpenCV ir gan.)	Creating interactive advertisements using machine vision neural networks (OpenCV, etc.)	Adaptyvios ir interaktyvios reklamos yra ateitis. Prie reklamos stendo montuojasi kamera kuri stebi reklamos žiūrėtojus ir priklausomai nuo to kas žiūri rodo skirtingą reklamą. Arba reklama žiūri į žmogų ir kviečia priėti.
21	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	Yra realus projektas kur bandoma suskaičiuoti viešojo transporto keleivius realiu laiku ir siųsti mažesnius/didesnius autobusus kai to reikia. Prognozuoti žmonių srautus į ateitį detektuoti vairuotojų vairavimo stilių ir kokybę
22	Aistis Raudys	Dirbtinis intelektas robotikoje: optimalus variklio valdymas naudojant neuroninius tinklus.	Artificial intelligence in robotics: optimal motor control using neural networks.	
23	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	
24	Aistis Raudys	Lietuvių kalbos rašybos taisymas naudojant gilaus mokymo metodus.	Correction of Lithuanian spelling using deep teaching methods.	
25	Aistis Raudys	Skraidančių mirko objektų sekimas	Tracking flying micro objects for destruction.	Naudojant OpenCV optiniame sraute surasti skraidantį objektą ir jį sunaikinti.
26	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
27	Aistis Raudys	Dirbtinio intelekto metodų panaudojimas autonominiam besimokančiam robotui	Autonomous Self-Learning Robot	Panaudoti roboto sensorių duomenis mokymuisi. Pradžioje virtualioje aplinkoje coppeliarobotics.com, vėliau realybėje.
28	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.
29	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
30	Algirdas Lančinskas	Optimizavimo algoritmų lyginamoji analizė	Benchmarking of optimization algorithms	
31	Algirdas Lančinskas	Jūrinių konteinerių krovos optimizavimas	Optimization of marine container loading	
32	Algirdas Lančinskas	Paslaugas teikiančių objektų vietų parinkimas	Optimization of facility locations	
33	Andrius Vytautas Misiukas Misiūnas	MTD/MBD temą "EEG signalų analizė"	EEG signal analysis	

34	Andrius Vytautas Misiukas Misiūnas	EEG signalų automatinis apdorojimas	Automatic processing of EEG signals	Šiame darbe galimas darbas su kelių tipų algoritmais, tiek klasikiniais, tiek ir pagrįstais mašinių mokymusi. Pagrindinės galimos darbo kryptys EEG pikų paieška arba priepuolių paieška EEG signaluose.
35	Andrius Vytautas Misiukas Misiūnas	Astronominių vaizdų klasifikavimas mašinių mokymosi metodais	Classification of astronomical images with machine learning methods	
36	Darius Plikynas	Propagandos aptikimas ir klasifikavimas socialinės medijos pranešimuose naudojant gilaus mokymo bei semantinės analizės metodus	Detection and classification of propaganda in social media news channels, using deep learning and semantic analysis methods	Šioje tyrimų srityje naudojami perspektyvūs NTL, kompiuterinės lingvistikos, GPT, kalbiniai modeliai ir kiti metodai. Šia tema vykdomas LMT projektas. Yra galimybė tolimesnėms studijoms doktorantūroje.
37	Darius Plikynas	Propagandos ir dezinformacijos socialinio poveikio tyrimai naudojant daugiaagentes imitacines sistemas ir gilaus mokymo metodus	Research of propaganda and desinformation social impact using multiagent systems and deep learning methods	Šioje tyrimų srityje naudojamas imitacinis daugiaagentių sistemų modeliavimas (pvz., su NetLogo ar pan.), mašininio mokymo ir kiti perspektyvūs metodai. Šia tema vykdomas LMT projektas. Yra galimybė tolimesnėms studijoms doktorantūroje.
38	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
39	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
40	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 patyrinti kelis klasikinius duomenų klasifikatorius
41	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.
42	Gražina Korvel	Propagandos aptikimas lietuviškame tekste naudojant transformatoriais pagrįstus iš anksto apmokytus daugiakalbius modelius	Utilizing transformer-based pre-trained multilingual models for propaganda detection in Lithuanian textual data	
43	Igor Katin	Skaitmeninių dvynių kūrimas.	Digital twins creation.	Skaitmeninė fizinio objekto ar proceso kopijos kūrimas, siekiant padėti optimizuoti verslo našumą. Creating a digital copy of a physical object or process to help optimize business performance.
44	Igoris Belovas	Dokumentų duomenų parengimas natūralios kalbos apdorojimo uždaviniams	Preparing document data for natural language processing tasks	Įmonių veikloje versle svarbi informacija fiksuojama dokumentuose (kad atitiktų įstatymų reikalavimus ir liktų galimybė atsekti istoriją). Kai veikloje dalyvauja kelios įmonės, jos tais dokumentais apsieičia (sutartys, sąskaitos). Jau kuris laikas apsieitimui nebėra naudojami popieriniai dokumentai, bet jais apsieičiama elektroniniais būdais (dažniausiai el. paštu ir per savitarnos svetaines). Gavus dokumentą (pdf, Word ar Excel formato), reikia iš jo ištraukti tekstą, o po to iš teksto – dokumente esančią svarbią informaciją (įmonių duomenis, datas, sumas). Informacijos ištraukimui naudojami natūralios kalbos apdorojimo metodai, tokie kaip įvardintų esybių atpažinimas (named entity recognition), tačiau jiems
45	Igoris Belovas	Rymano dzeta funkcijos skaičiavimo algoritmų CPU ir GPU lygiagrečio lyginamoji analizė	Comparative analysis of CPU and GPU parallelizations of the Riemann zeta function calculation algorithms	Rymano dzeta funkcija yra vienas iš svarbiausių analitinės skaičių teorijos įrankių. Su Rymano dzeta funkcijos reikšmių pasiskirstymo savybėmis yra glaudžiai susijusi Rymano hipotezė – viena iš aktualiausių šiuolaikinės matematikos neišspręstų problemų. Darbo tikslas – susipažinti su kai kuriais šiuolaikiniais dzeta funkcijos reikšmių skaičiavimo algoritmais, realizuoti juos programiškai ir atlikti realizacijų CPU ir GPU lygiagrečio efektyvumo palyginimą.

46	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.
47	Jolita Bernatavičienė	Aritmijų aptikimo algoritmų sukūrimas ir tyrimas EKG signaluose	Development and evaluation of algorithms for arrhythmia detection in ECG signals	
48	Jolita Bernatavičienė	Panašumo matų taikymas EKG pūpsnių klasterizavime	Application of similarity measures for clustering RR intervals of ECG signals	
49	Julius Žilinskas	Pusiau teigiamai apibrėžtas optimizavimas	Semidefinite programming	
50	Julius Žilinskas	Kalnų kelionių technikos trasų įveikimo modeliavimas ir optimizavimas	Imitation and optimization of accomplishment of mountaineering routes	
51	Linas Bukauskas	Apgaulės paslaugų tyrimai: atvejo analizės	The research of deception service: case scenario of abuse	Darbas atliekamas kibernetinio saugumo laboratorijoje.
52	Linas Bukauskas	eBPF srutų valdymo tyrimai Linux branduolio lygyje	The research of high-level tracing for Linux enhanced Berk	Darbas atliekamas kibernetinio saugumo laboratorijoje.
53	Linas Bukauskas	Klasifikavimo metodų tyrimai kibernetinio saugumo kontekste	Research of Classification methods in cybersecurity	Darbas atliekamas kibernetinio saugumo laboratorijoje.
54	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
55	Linas Laibinis	Sistemų prototipų kūrimas ir skaitinis įvertinimas naudojant diskretinių įvykių simuliacijos metodus	System prototyping and quantitative assessment by discrete event simulation techniques	Diskretinių įvykių simuliacijos aplinkos leidžia sukurti būsimos paskirstytos sistemos prototipą, aprašyti joje vykstančius įvykius, komunikacijas tarp komponentų, galimus gedimus ir modeliuoti laiko pauzes. Darbo metu sukurtas sistemos prototipo simuliacijos duotų galimybę skaitiškai įvertinti sistemos darbo charakteristikas (efektyvumą, patikimumą ir t.t.) bei tuo pačiu palyginti skirtingas tokių sistemų konfigūracijas.
56	Linas 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.
57	Linas 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 komunikavimo 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.
58	Linas Laibinis	Automatizuotos matematinio įrodymo ir sistemų verifikavimo aplinkos	Automated environments for mathematical proof and system verification	Darbe 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.
59	Linas Litvinas	Dirbtiniai neuroniniai tinklai laiko eilutėms	Artificial neural networks for time series	
60	Linas Litvinas	Biojutiklio daugiakriterinis optimizavimas	Multiobjective optimization of biosensor	
61	Pijus Kasparaitis	Lietuvių kalbos sintezė naudojant neuroninius	Text-to-speech synthesis of Lithuanian based on neural	Dėstytoji dėl temos rašyti šiuo e-pašto adresu: pkasparaitis@yahoo.com

62	Pijus Kasparaitis	Neuroninių tinklų spartinimas	Acceleration of neural networks	
63	Rimantas Vaicekuskas	Pamaininio darbo tvarkaraščio optimizavimo algoritmų lygiagretus įgyvendinimas	Parallel implementation of shift scheduling optimization algorithms	
64	Rimantas Vaicekuskas	Pamaininio darbo tvarkaraščio optimizavimo algoritmai	Shift scheduling optimization algorithms	
65	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 paprastas Perl reguliarias išraiškas (o vėliau gal būt ir sudėtingesnę lingvistinę analizę) automatiškai išgauti kiekviename straipsnyje publikuotų medžiagų kristalų parametrus.
66	Saulius Gražulis	Informacijos išgavimas iš mokslinių straipsnių	Extracting scientific facts from research papers	Pastaruoju metu publikuojamų mokslinių straipsnių skaičius auga eksponentiškai [1]. Tikėtina, kad šiuo metu straipsnių paskelbiama tiek daug, jog net ekspertai negali fiziškai perskaityti visų straipsnių savo darbų tematika, jau nekalbant apie gretimų tyrimo krypčių straipsnius. Mokslo žinios tampa išsklaidytos po daugelį žmogui sunkiai aprėpiamų šaltinių, jas vis sunkiau susisteminti, o tarpdisciplininiai tyrimai – vienas svarbių inovacijos šaltinių – dėl šių priežasčių neatskleidžia viso savo potencialo. Turėtų būti įmanoma sukurti apmokytus DNT ir/arba kitas kompiuterines sistemas, gebančias iš žmogui skirto teksto (mokslinio straipsnio, patento, monografijos, disertacijos, preprinto) išgauti faktinę mokslinę informaciją, pvz. medžiagos formulę, kristalo ir molekulės struktūros aprašymą, molekulės chemines ir fizines savybes, tų savybių epistemologinį statusą (matavimo rezultatas, teorinis skaičiavimas), ir pateikti šią informaciją formalizuotu, automatiniame apdorojimui tinkamu pavidalu, pavyzdžiui, formaliai specifikuotą CIF, CML a SDF failų pavidalu, reliacinių duomenų lentelių pavidalu, RDF failų pavidalų naudojant kurią nors žiniatinklio ontologiją ar pan. Darbe bus pasiūlyta, pasitelkiant įvairias teksto analizės priemones (teksto segmentatorius, simbolių atpažinimo programas, tokias kaip 'tesseract', dirbtinius neuroninius tinklus, mašinių mokymo programas) išgauti iš mokslinių straipsnių vertingus faktus ir apjungti juos į sistemingą duomenų bazę greitai ir išsamiai paieškai.
67	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 kristalografine ir cheminę informaciją, sukurti. Tai leistų šimtams tyrėju 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.

68	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 sukaupia 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.
69	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. Naujos žiniatinklio priemonės leidžia ne tik parsisiųsti informaciją iš nutolusios svetainės, bet ir interaktyviai pateikti informaciją šioms svetainėms arba paleisti procesus nutolusiuose 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 „nulaužti“; programinę įrangą, kurios pagrindu veikia šios svetainės, ir pasiūlyti, kaip galima nuo išnagrinėtų grėsmių apsisaugoti.
70	Saulius Gražulis	Teisingumo įrodymų palaikymas daugiaparaigminėje 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 assemblerio 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 teigiamai apie programą įrodyti, integruotą į aukšto lygio programavimo kalbos kompiliatorių. Pirmame etape planuojama naudoti specialiai tam tikslui sukurtą programavimo kalbą ir kompiliatorių, kuriuos, reikaliui 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.
71	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 molekulės ar į jas panašios molekulės. Surasti šių molekulių kontaktus su *savo pačių* kristalais, aprašyti šių kontaktų paviršius. Surasti tas molekules, kurių kompleksai su baltymais patalpinti PDB archyve. Palyginti mažos molekulės kristalo ir baltymo kontaktinius paviršius; nustatyti, ar pagal šių paviršių panašumą galima prognozuoti susirišimą su baltymu.

72	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, centriniam serveriui išėjus iš rikiuotės ar nutrūkus ryšiui 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 išnagrinėti įvairius galimus sistemos variantus, įvertinant įvairius kompromisus (prieinamumas/neprieštarinumas, prieinamumas/patikimumas ir pan.).
73	Saulius Gražulis	Didelės apimties duomenų archyvavimas paskirstytoje duomenų saugykloje	Archiving high volume scientific data in a distributed peer-to-peer repository	Naujausios IUCr (Tarptautinės kristalografų sąjungos, angl. International Union of Crystallography) rekomendacijos siūlo archyvuoti visus pradinius 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.
74	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	Pastaruosiu 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 (nebendramatės) 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 erdvinių 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 nedomuliuotos trimatės simetrijos grupės aprašus, ir integruoti šiuos algoritmus į duomenų bazę COD, kad būtų galima efektyviai kaupti ir tvarkyti neperiodinių medžiagos pavyzdžių aprašymus.

75	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 parametrų tikimybių pasiskirstymų pasiskirstymų radimui ir atnaujinimui, naudojant Bajeso statistikos metodus, ir skaičiavimų organizavimas.
76	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, reakcingumą).
77	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 tokia molekulinio grafo viršūnė yra ciklas, 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 tokius struktūras, aptiktas molekuliniuose medžiagos kristaluose. Darbo metu bus siūloma sukurti programas, 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 aptiktą mazgų duomenų bazę.
78	Saulius Gražulis	Kvantinės mechanikos metodų pritaikymas kristalografinių duomenų validavimui	Validating experimental crystallographic data using first-principles quantum mechanics	Darbe bus siūloma pritaikyti kelias atviro kodo kvantinės mechanikos programas (Abinit, Quantum Espresso) atviros kristalografines duomenų bazės Crystallography Open Database (COD, https://www.crystallography.net/) duomenims patikrinti ir galimoms eksperimento ar duomenų tvarkymo klaidoms aptikti.
79	Saulius Gražulis	DNT ir mašininio mokymo pritaikymas kristalų savybėms prognozuoti	Applying ANN and machine learning for crystal property prediction	Nauji Dirbtinių neuroninių tinklų (DNT) ir mašininio 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 straiptniai talpina informaciją apie šių kristalų savybes. Darbe bus siūloma panaudoti COD DB duomenų imtį DNT ar mašininio mokymo sistemai apmokyti, siekiant prognozuoti įvairias kristalo savybes (pvz. kristalo elementarus narvelio tūris, lydymosi temperatūrą ir pan.). Gauti tinklai gali būti naudojami COD ir kitų publikuotų duomenų validavimui, naujų kristalų savybių nustatymui.

80	Saulius Gražulis	COD P1 narvelių skaičiavimas	Computing chemical structures in P1 cell for the Crystallography Open Database	Kristalografiniai duomenų failai pateikia minimalų parametų 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.
81	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 ištirti. (Research Proof-of-Stake protocols focusing on the latest achievements in Ethereum 2.0 Proof-of-Stake protocol. Propose protocol improvements and conduct experiments.)
82	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 vykdant 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).
83	Severinas Zubė	Topologinė duomenų analizė	Topological data analysis	
84	Severinas Zubė	Kieto kūno judėjimo modeliavimas erdvėje	Modeling of solid body motion in space	
85	Tadas Meškauskas	Automatizuoti biologinių membranų defektų atpažinimo algoritmai atominės jėgos mikroskopijos vaizduose	Automatic algorithms for detection of defects in atomic force microscopy images	Su motyvuotais studentais galėsime suderinti įvairias tematikos variacijas/potemes.
86	Tadas Meškauskas	Automatizuotos mediciniinių signalų analizės algoritmai	Algorithms for Automatic Analysis of Clinical Signals	Su motyvuotais studentais galėsime suderinti įvairias tematikos variacijas/potemes.
87	Tadas Meškauskas	Algoritimų triukšmui šalinti duomenyse analizė	Analysis of Algorithms for Data Denoising	Su motyvuotais studentais galėsime suderinti įvairias tematikos variacijas/potemes.
88	Tadas Meškauskas	Signalų atpažinimo ir prognozavimo algoritmai	Recognition and Forecasting Algorithms for Signals	Su motyvuotais studentais galėsime suderinti įvairias tematikos variacijas/potemes.
89	Tadas Meškauskas	Baigtinių elementų metodai kompiuteriniame procesų vykstančių biologinėse membranose modeliniuose	Finite element methods for computer modelling of processes in biological membranes	Su motyvuotais studentais galėsime suderinti įvairias tematikos variacijas/potemes.
90	Virginijus Marcinkevičius	Garso šaltinio lokalizavimo metodų tyrimas	Investigation of sound source direction detection methods	Tikslas palyginti giliais neuroniniais tinklais grįstų algortimų garso šaltinio lokalizavimo galimybes, palyginus su klasikiniais metodais ir pasiūlyti algortimų modifikacijas siekiant pagerinti algortimų tikslumą.
91	Virginijus Marcinkevičius	Roboto manipulatoriaus valdymo algortimų palyginimas	Comparison of control algorithms for robot manipulators	Darbe bus naudojamas TurtleBot robotas su manipulatoriu. Tikslas ištirti kelis metodus skirtus išmokyti robotą paimti įvairius objektus ir juos perdėti į kitą vietą.