



**Vilnius
universitetas**

Doktorantas:
Brendonas Stakauskas
2022-2026

Darbo vadovas:
Dr. Virginijus Marcinkevičius

2022/2023 metai
I metai, II pusmetis



**Giliais neuroniniais tinklais grįstų
mašininio mokymo metodų taikymas
viruso mutacijų trajektorijai
prognozuoti**

TURINYS

1. Studijų plano vykdymas
2. Problemos apibrėžimas, tyrimo objektas ir tikslai
3. Trumpas per pusmetį gautų mokslinių rezultatų pristatymas
4. Kito pusmečio darbo planas



Studijų plano vykdymas

Studijų planas, vykdymo suvestinė

Studijų metai	Egzaminai		Dalyvavimas konferencijose		Publikacijos		
	Planas	Įvykdyta	Planas	Įvykdyta	Planas	Įvykdyta	Būklė
I (2022/2023)	2	2	1	1 (tarptautinė)	1	1 (konferencijos medžiagoje) darbu	
II (2023/2024)	2	0	1	0	1	0	
III (2024/2025)	0	0	1	0	1	0	
IV (2025/2026)	0	0	1	0	1	0	

Ataskaitinio pusmečio darbo planas ir jo įvykdymas

Egzaminai 2022/2023 (II pusmetis)		
Planas	Įvykdyta	Būklė
Informatikos ir informatikos inžinerijos tyrimo metodai ir metodika	2023-06-27	Egzaminas <u>išlaikytas.</u>

Ataskaitinio pusmečio darbo planas ir jo įvykdymas

Dalyvavimas konferencijose 2022/2023 (II pusmetis)

Planas	Įvykdyta	Konferencijos tipas
IEEE Conference on Computational Intelligence in Bioinformatics and Computational Biology	Pristatytas plakatas Stakauskas B.: “Comparison of Phylogenetic Inference Methods Accuracy Using SARS-CoV-2 Data”	Tarptautinė konferencija

Visų mokslinių tyrimų ir disertacijos rengimo etapai

1. Mokslinių tyrimų disertacijos tema apžvalga ir analizė
2. Mokslinio tyrimo vykdymas
 1. Tyrimo metodikos sudarymas
 2. Teorinis tyrimas
 3. Empirinis tyrimas
 4. Gautų duomenų analizė, apibendrinimas, išvadų parengimas
3. Atskirų daktaro disertacijos dalių (tyrimo metodikos, rezultatų, ginamų teiginių, išvadų, ir kt.) parengimas
4. Daktaro disertacijos parengimas ir svarstymas padalinyje
5. Daktaro disertacijos gynimas

**Problemos
apibrėžimas,
tyrimo objektas
ir tikslai**

Tyrimo objektas

Virusų baltymų sekos ir giliaisiais neuroniniais tinklais grįsti mašininio mokymo algoritmai skirti prognozuoti viruso mutacijas.

Tyrimo problemos

- Sąryšio tarp viruso proteinų sekų nustatymas;
- Duomenų aibės, atspindinčios istorines mutacijas, sudarymas;
- Informatyvios metrikos parinkimas;

Tyrimo tikslas

Sukurti giliaisiais neuroniniais tinklais ir natūralios kalbos apdorojimo algoritmais grįstą metodą leidžianti numatyti viruso mutacijos trajektoriją.

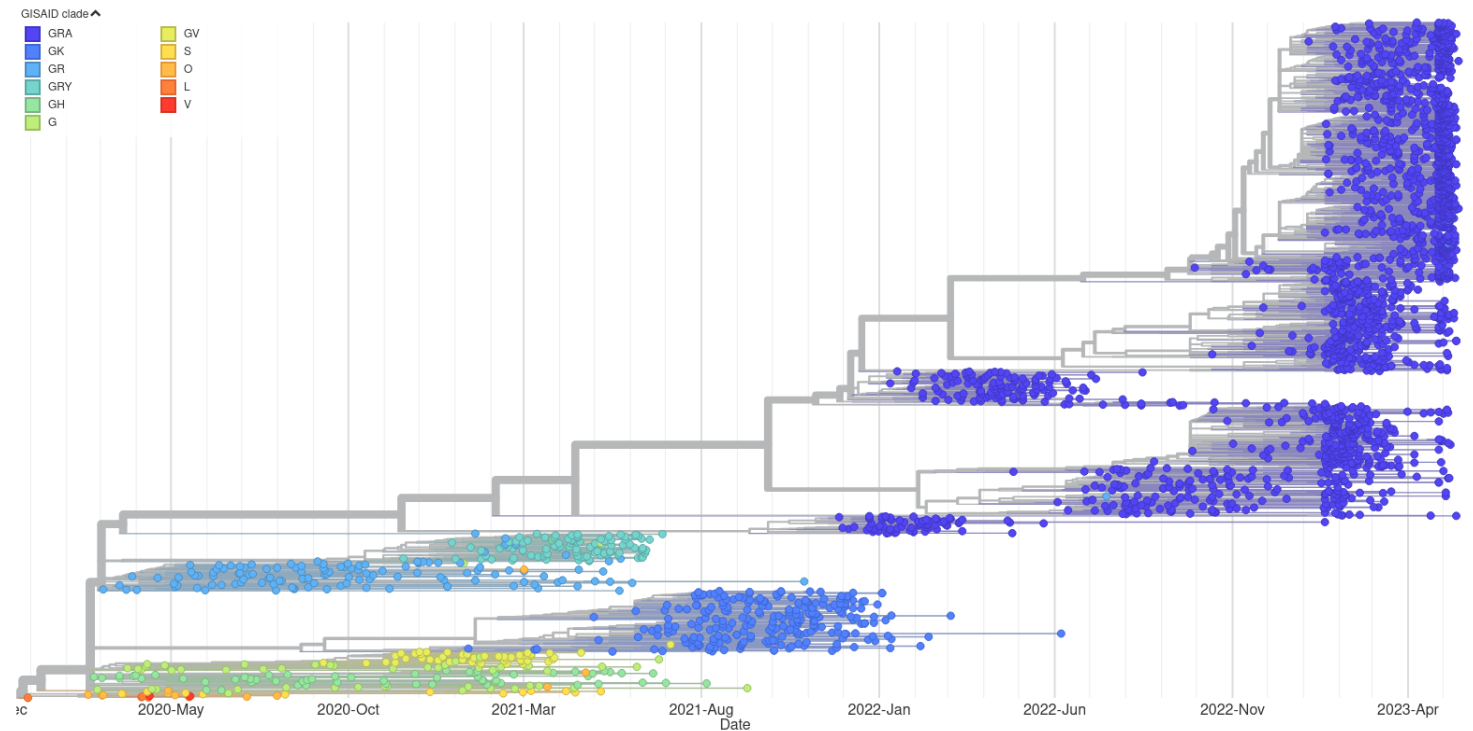
Tyrimo uždaviniai

- Atlikti literatūros analizę, išanalizuoti *state-of-the-art* algoritmus viruso baltymo mutacijų prognozavimui.
- Atkartoti literatūroje pateikiamų metodų rezultatus.
- Sukurti metodą duomenų aibės, atspindinčios istorines mutacijas, sudarymui.
- Sukurti duomenų aibę tyrimui.
- Pasiūlyti naują metodą viruso mutacijoms numatyti.
- Atlikti eksperimentinius tyrimus, palyginant pasiūlytą metodą su literatūroje aprašytais metodais.

**Trumpas per
pusmetį gautų
mokslinių rezultatų
pristatymas**

Filogenetiniai medžiai

Filogenetinis medis, tai medis nurodantis evoliucinius ryšius tarp įvairių organizmų.



Filogenetinių medžių sudarymo algoritmai

- Yra daugiau nei vienas būdas sudaryti filogenetinį medį.
- Lyginant algoritmus naudojami simuliuoti duomenys.
- Dažnas lyginimo parametras – algoritmo vykdymo greitis.

Algoritmų palyginimas

- Lyginami trys algoritmai
 - RAxML
 - FastTree
 - IQ-TREE
- Duomenų aibę sudaro 2968 sekos.
- Rezultatai lyginami su nextstrain gautais rezultatais

Rezultatai

Metric	Tree building algorithm		
	<i>RAxML</i>	<i>IQ-TREE</i>	<i>FastTree</i>
RF	1461	1478	1447
WRF	0.1565	0.1629	0.1580
L2	0.004195	0.00440	0.00437

Table 1: Results for trees that were reconstructed using RAxML, IQ-TREE and FastTree algorithms.

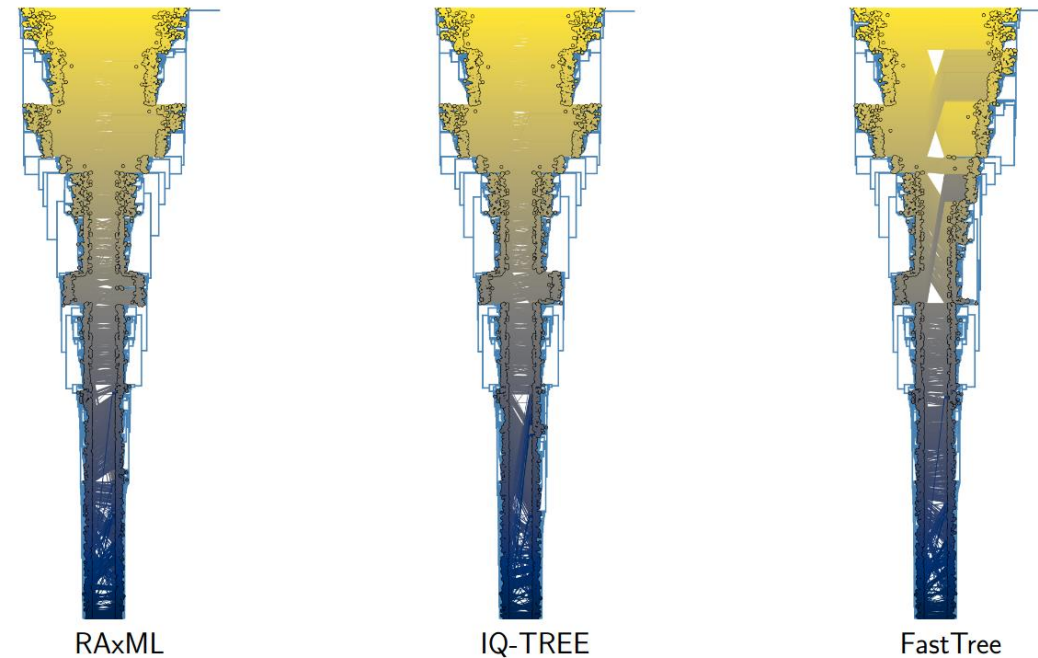


Figure 3: Reference and inferred tree tanglegrams. The reference tree is shown on the left side of the tanglegram. The sudden shift in hue (where differences indicated by tangled lines can be hardly noticed) shows non-aligned elements of the tree.

Kito pusmečio darbo planas

Tyrimo metodikos sudarymas:

- Problemų, kylančių iš tikslo, suformulavimas būsimiems eksperimentiniams ir analitiniams tyrimams.
- Uždavinių, skirtų spręsti nustatytoms problemoms, aprašymas.
- Tyrimo metodikos, tinkamos spręsti iškeltiems uždaviniams, parinkimas.
- Teorinio ir empirinio tyrimų planavimas pagal pasirinktą metodiką.

Publikacijų rengimas

Mokslinių tyrimų disertacijos tema apžvalga (konferencijos darbų medžiagoje)

Dalyvavimas konferencijose

Dalyvavimas konferencijoje Lietuvoje