\section{Įvadas}

\section{Literatūros apžvalga}

\subsection{Baltymų sąveikos su skirtingomis molekulėmis}

Trumpai apie baltymą kaip molekulę

Trumpai apie baltymo aktyvųjį centrą ir galinčius susikurti ryšius

Trumpai apie sąveikas baltymo su ligandais, DNR, kitais baltymais

Pavyzdys kiekvienai iš sąveikų

3-4 pavyzdžius sąveikos su ligandais (pasirinkti skirtingų tipų baltymus bei ligandus)

Aprašyti skirtingus aktyvius centrus (su hemu ir pan.)

\subsubsection{Baltymo su ligandu surišimo konstanta}

Daugiau išsiplėsti. Kas vadinama ligandu?

Sąveikos formulė, surišimo konstanta

Būdai matuoti surišimo konstantą in vitro (ELISA ir t.t.)

\subsubsection{Baltymo struktūros pasikeitimai skirtingose sąlygose}

„Spynos ir rakto“, „indukuoto įtalpinimo“, „konformacijos išrinkimo“ teorijos

Problema surišimo konstantos nustatymo (ką pasakojo Vytautas)

\subsection{Baltymo ir ligando sąveikos modeliavimas}

Šiek tiek istorijos bei koks yra tame tikslas.

\subsubsection{Ligando įvedimas į baltymą}

„Docking“. Aprašyti kelius algoritmus.

\subsection{Vertinimo funkcijos baltymo sąveikos prognozei}

Šiek tiek daugiau istorijos.

\subsubsection{Klasikinės vertinimo funkcijos}

Aprašyti 3-5 klasikinių vertinimo funkcijų algoritmus.

\subsection{Mašininis mokymasis}

Bendra atsiradimo istorija.

Apmokymo ir testavimo principas.

Regresija, klasifikacija: skirtumai (trumpai).

Mašininio mokymosi taikymas.

\subsubsection{Mašininio mokymosi algoritmai}

Pradėti nuo pačio paprasčiausio Decision Tree, pasistengti įsigilinti į formules.

Atsitiktiniai miškai.

Atraminių vektorių mašinos.

\subsubsubsection{Dirbtiniai neuroniniai tinklai}

Lašelis istorijos, taikymas.

Skirtingi dirbtinio neuroninio tinklo tipai (4-6 pagrindinių)

Konvoliuciniai neuroniniai tinklai – plačiau (nes šis bus taikomas darbe)

\subsubsection{Mašininio mokymosi taikymas bioinformatikoje}

Sujungti biologiją su mašininiu mokymusi.

Aprašyti 2-3 mašininio mokymosi algoritmus, taikomus bioinformatikos srityje.

Aprašyti 3-4 mašininio mokymosi vertinimo funkcijas (paskutinė būtų referentinė: DeepVS).

\subsubsubsection{Duomenų paruošimas pateikimui į modelį}

Priminti apie duomenų kaupimo greitį ir apie tai, kad mašininio mokymosi efektyvumas stipriai priklauso nuo duomenų apimties.

Aprašyti viešai prieinamas duombazes.

Akcentuojant konvoliucinius tinklus, aprašyti duomenų virsmą į skaičius, kuriuos suvalgys mašininio mokymosi modelis.

Priminti apie surišimo konstantų problemą.

\subsubsubsection{Vertinimo funkcijos įverčiai}

Įverčiai, taikomi modelį įvertinti (AUC, confusion matrix ir kiti).

Pateikti kelių mašininio mokymosi vertinimo funkcijų įverčio pavyzdžius (iš tų funkcijų aprašų). Tarpusavyje jas palyginti nelabai išeis, nes reikalingi vienodi duomenys.