

Struktūrinė bioinformatika pro skaičiuojamosios geometrijos prizmę

Dr. Kliment Olechnovič

2025-11-25



**Vilniaus
universitetas**

- ▶ **2017** Mokslų daktaras (fizinių mokslų srities informatikos mokslų krypties), Vilniaus universitetas
 - ▶ disertacija „*Baltymų ir nukleorūgštčių erdvinių struktūrų analizės ir vertinimo metodai: kūrimas ir taikymas*“
- ▶ **2012** Informatikos magistras (kompiuterinis modeliavimas), Vilniaus universitetas
- ▶ **2009** Informatikos bakalauras (bioinformatika), Vilniaus universitetas

Darbo patirtis

- ▶ **2025–dabar** Vyresnysis mokslo darbuotojas (Vilniaus universitetas / Gyvybės mokslų centras / Biotechnologijos institutas)
- ▶ **2025** Vizituojantis mokslininkas, 8 savaitės (EPFL LPDI, Lozana, Šveicarija)
- ▶ **2023–2025** MSCA Postdoctoral Fellow, 2 metai (CNRS Laboratoire Jean Kuntzmann, Grenoblis, Prancūzija)
- ▶ **2020–2023** Vyresnysis mokslo darbuotojas (Vilniaus universitetas / Gyvybės mokslų centras / Biotechnologijos institutas)
- ▶ **2021–2022** Vizituojantis mokslininkas, viso 28 savaitės (CNRS Laboratoire Jean Kuntzmann, Grenoblis, Prancūzija)
- ▶ **2017–2020** Mokslo darbuotojas (Vilniaus universitetas / Gyvybės mokslų centras / Biotechnologijos institutas)
- ▶ **2019–2020** Vizituojantis mokslininkas, 9 savaitės (Inria, Grenoblis, Prancūzija)
- ▶ **2013–2017** Jaunesnysis mokslo darbuotojas (Vilniaus universitetas / Biotechnologijos institutas)
- ▶ **2010–2013** Inžinierius tyréjas (Vilniaus universitetas / Biotechnologijos institutas)
- ▶ **2009–2010** Laborantas (Biotechnologijos institutas, Vilnius)
- ▶ **2007–2008** C++ programuotojas (4Team Corporation, Vilnius)

Svarbiausi darbo įvertinimai

- ▶ **2025** Lietuvos Mokslo Premija 2024, skirta Justui Dapkūnui, Dariui Kazlauskui, Kliment Olechnovič ir Česlovui Venclovui už darbų ciklą „Baltymų struktūrinės bioinformatikos metodų kūrimas ir taikymas (2010–2023)“
- ▶ **2019** Lietuvos Moksly Akademijos jaunųjų mokslininkų stipendija
- ▶ **2018** Konkurso „Geriausia daktaro disertacija Lietuvoje 2017 metais“ laureatas
- ▶ **2015** Lietuvos Moksly Akademijos apdovanojimas už geriausius jaunųjų mokslininkų darbus 2014 metais
- ▶ **2013** INFOBALT skatinamoji stipendija jauniesiems mokslininkams

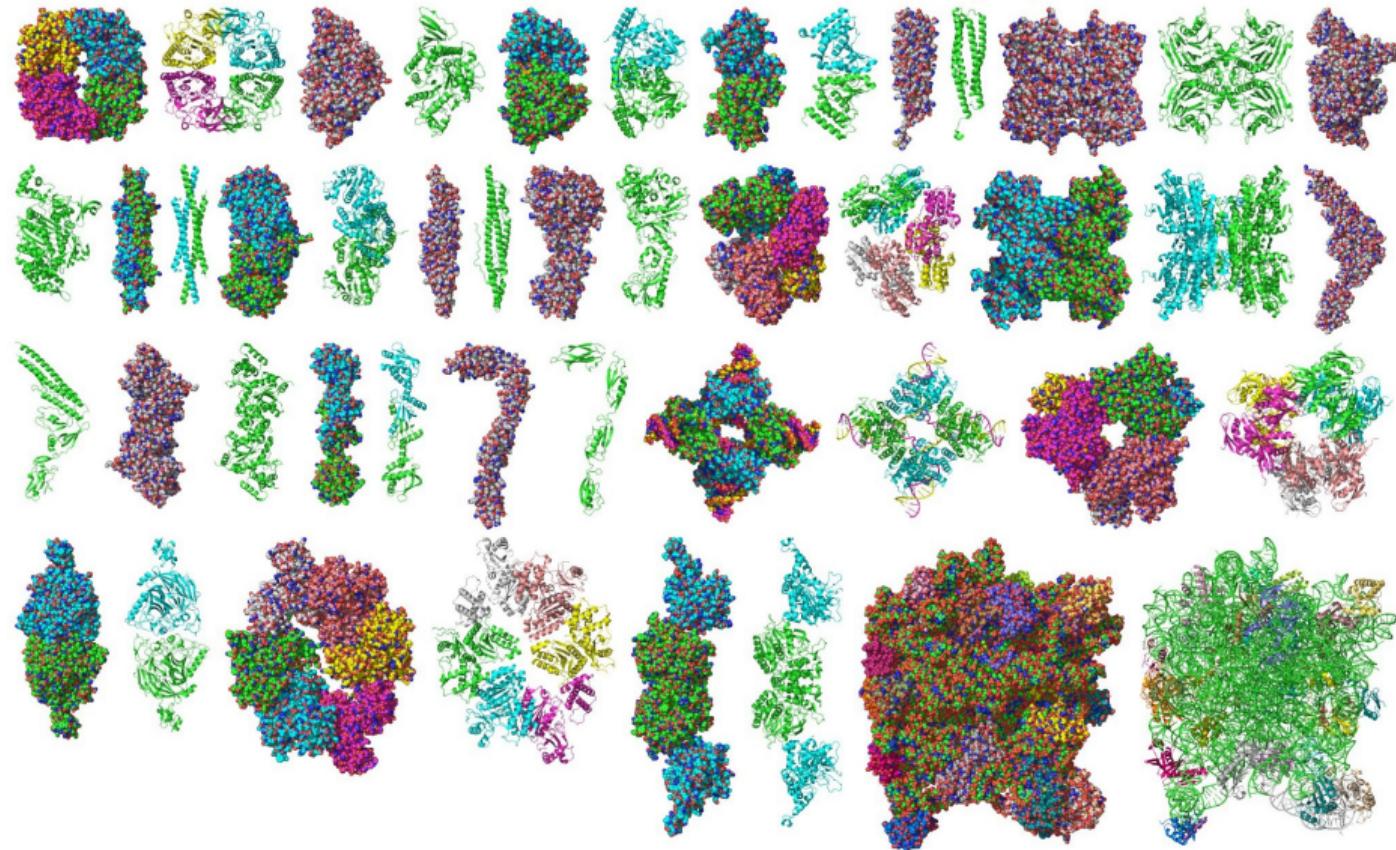
Mokslinės veiklos apžvalga

Mano pagrindinė mokslinė veikla — kurti naujus efektyvius struktūrinės bioinformatikos metodus. Visų pirma, makromolekulių struktūrų modeliavimo bei modelių analizės ir vertinimo metodus.

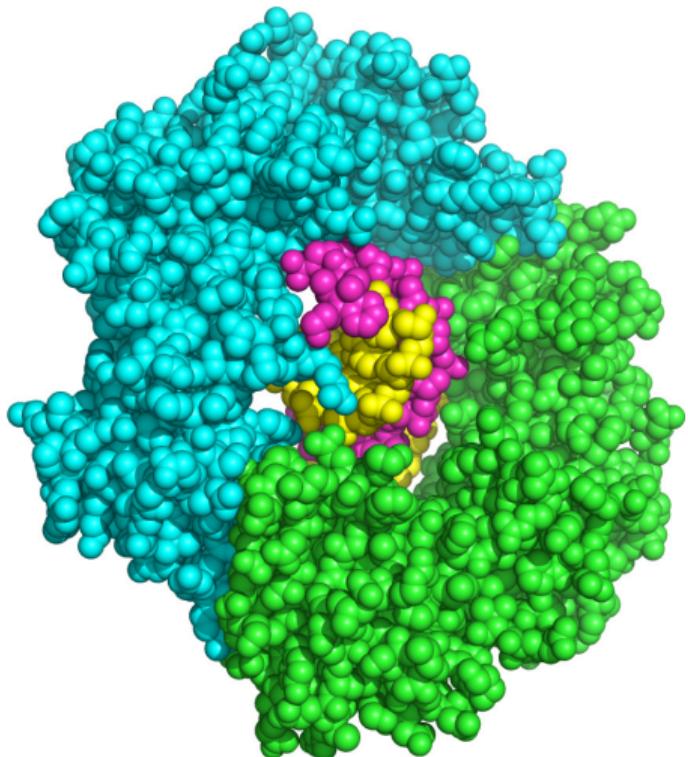
Šiai dienai resultatai publikuoti 27-iuose moksliniuose straipsniuose (iš jų esu 14-os straipsnių pirmas autorius).

Bendras citavimų skaičius (pagal Google Scholar) yra 1442, h-index 19.

Pagrindiniai objektai — makromolekulių struktūros



Pagrindinės problemos



Dažnos problemos:

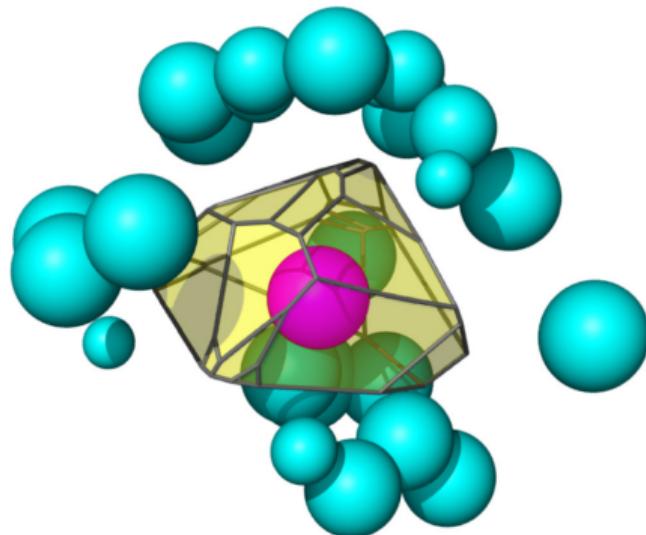
- ▶ kaip aprašyti ir analizuoti sąveikas
- ▶ kaip pasirinkti geriausią komplekso modelį

Mano siūlomi sprendimai įtraukia:

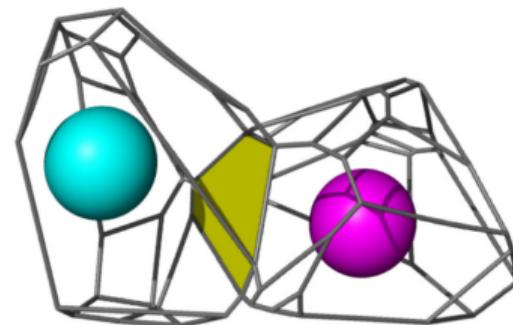
- ▶ skaičiuojamosio geometrijos algoritmus
- ▶ mašininj mokymąsi
- ▶ atviros programinės įrangos kūrimą

Struktūrų analizė naudojant Voronojaus diagramas

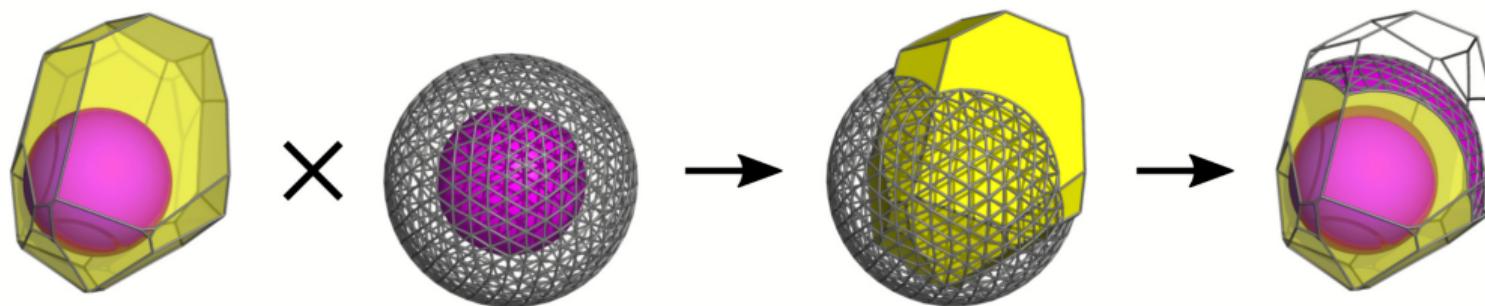
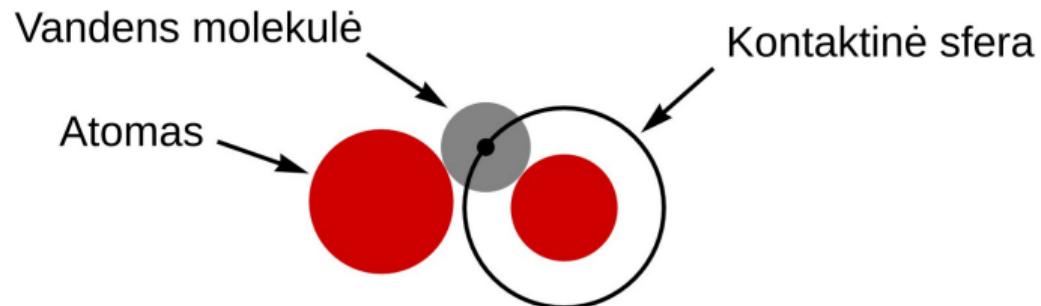
Atomo Voronojaus ląstelė,
apsupta kaimyninių atomų



Dvieju Voronojaus ląstelių bendra sienelė -
kontakto tarp atomų reprezentacija

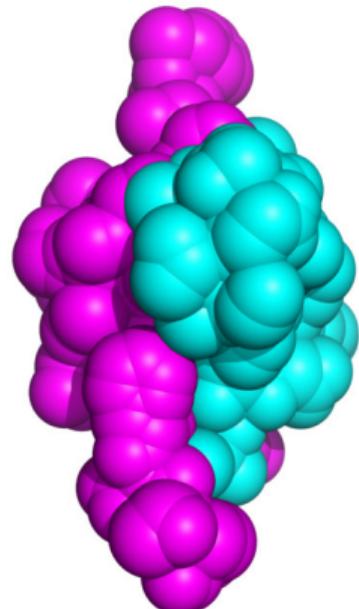


Tirpikliui prieinamo paviršiaus įtraukimas

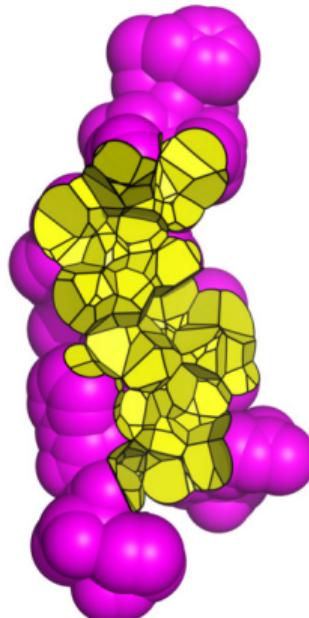


Sąveikų tarp subvienetų kontaktai

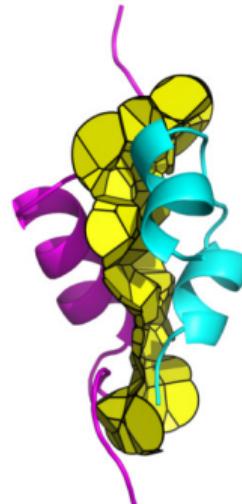
Insulino heterodimero
tirpikliui prieinamas paviršius,
nuspalvintas pagal subvienetus



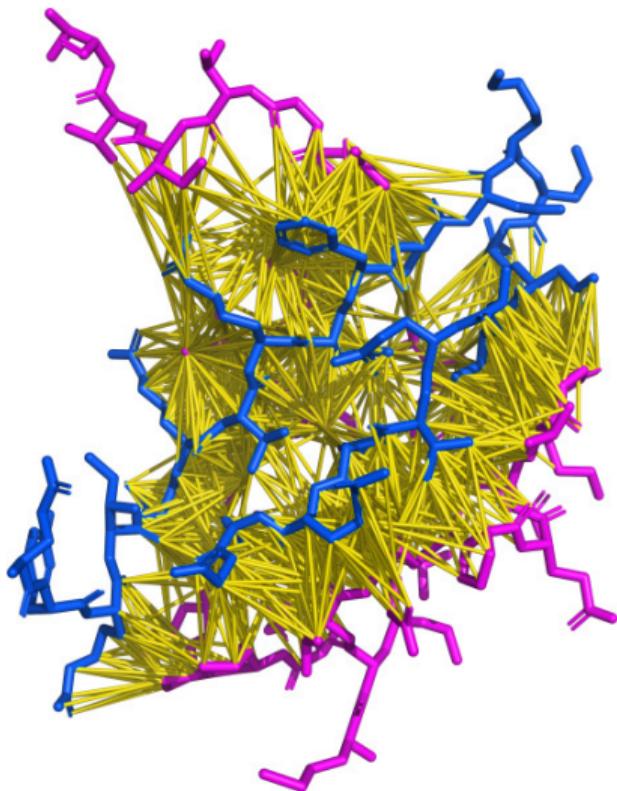
Sąveikos tarp subvienetų
kontaktai, parodyti kartu su
vieno subvieneto paviršiumi



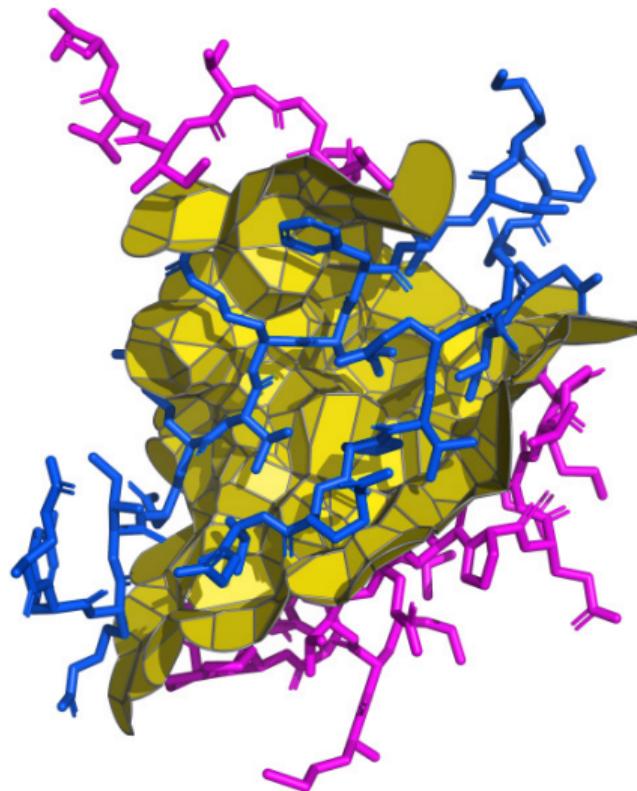
Sąveikos tarp subvienetų
kontaktai, parodyti kartu su
abiejų subvienetų kontūrais



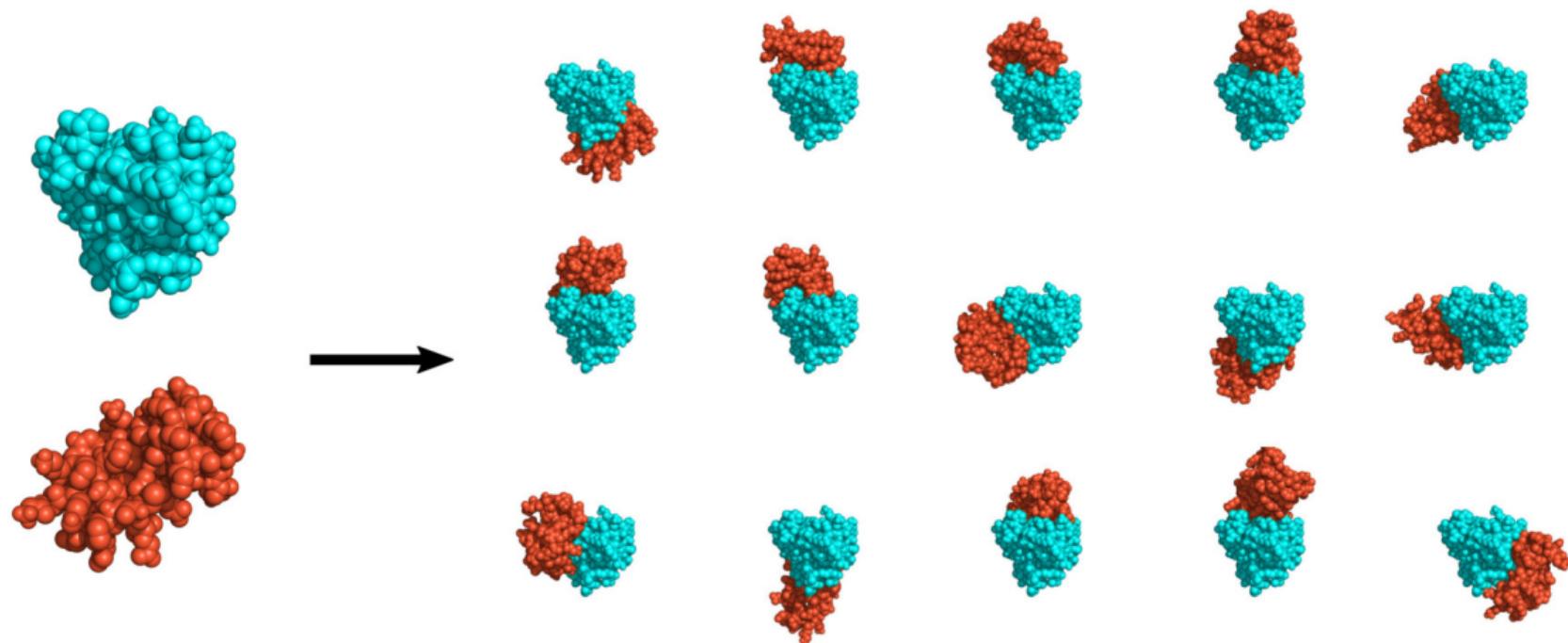
Sąveikę tarp subvienetų kontaktai



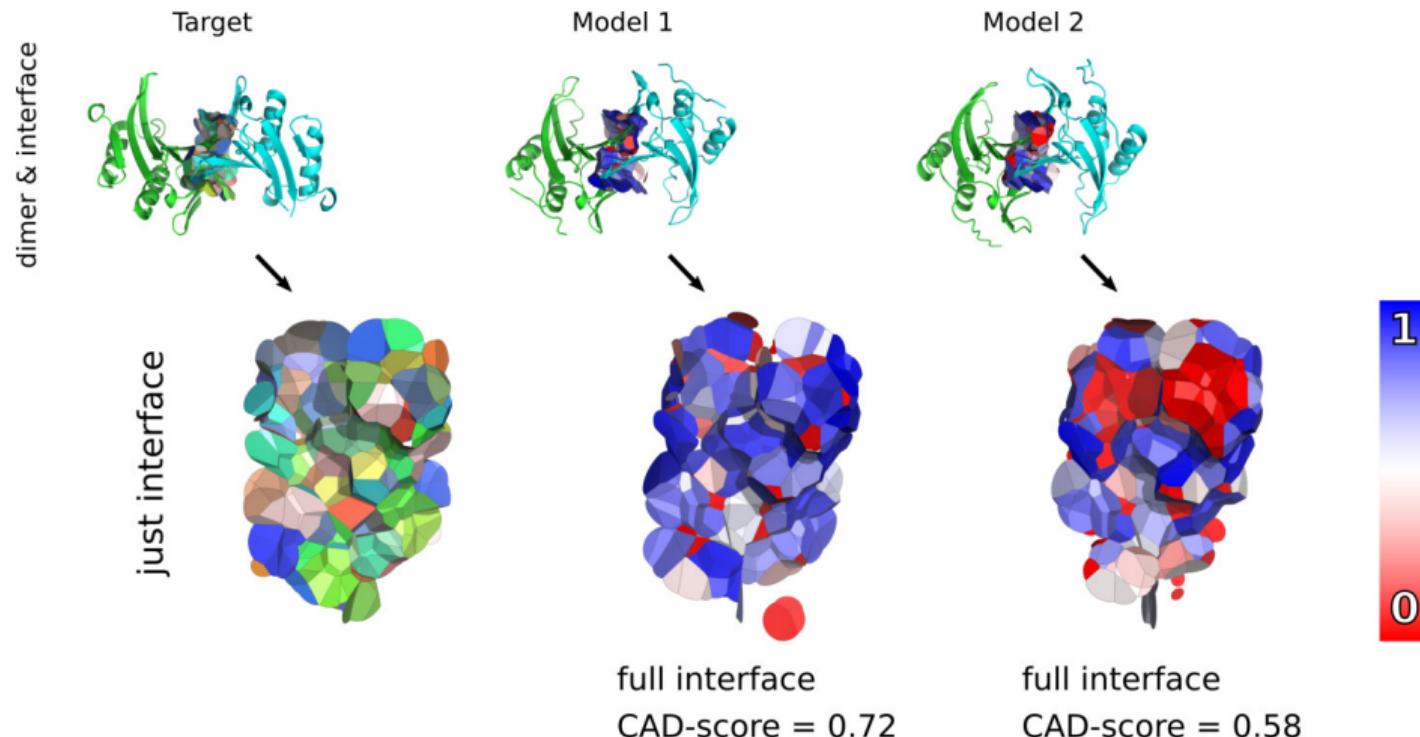
VS



Subvienetai gali turėti skirtingai sumodeliuotas sąveikas

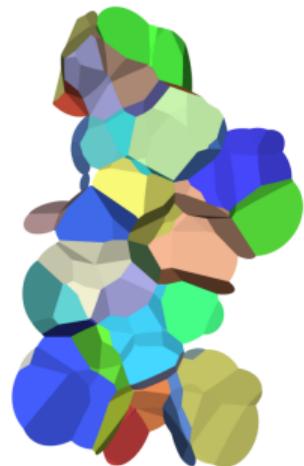


Sąveikų palyginimas su CAD-score (Contact Area Difference score)



Olechnovič, Kulberkytė and Venclavas. *CAD-score: a new contact area difference-based function for evaluation of protein structural models*. Proteins (2012)

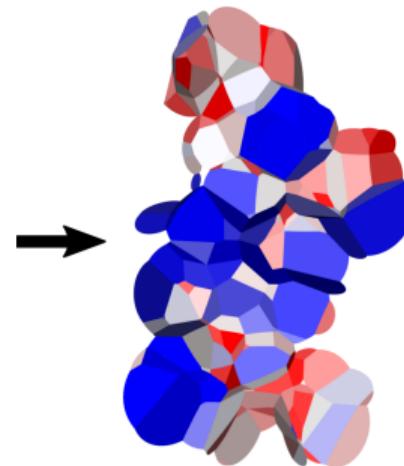
Sąveikų veritinimas naudojant plotų statistinj̄ potencialą (pvz. VoroMQA)



Interface
contact areas

$$\begin{aligned} E(a_i, a_j, c_k) &= \log \frac{P_{\text{exp}}(a_i, a_j, c_k)}{P_{\text{obs}}(a_i, a_j, c_k)} = \\ &= \log \frac{F_{\text{exp}}(\text{area}(a_i), \text{area}(a_j), \text{area}(c_k))}{F_{\text{obs}}(\text{area}(a_i, a_j, c_k))} \\ E_n(\Omega_\phi) &= \frac{\sum_{\omega \in \Omega_\phi} E(\text{type}_\omega) \cdot \text{area}_\omega}{\sum_{\omega \in \Omega_\phi} \text{area}_\omega} \end{aligned}$$

Statistical potential
for contact areas

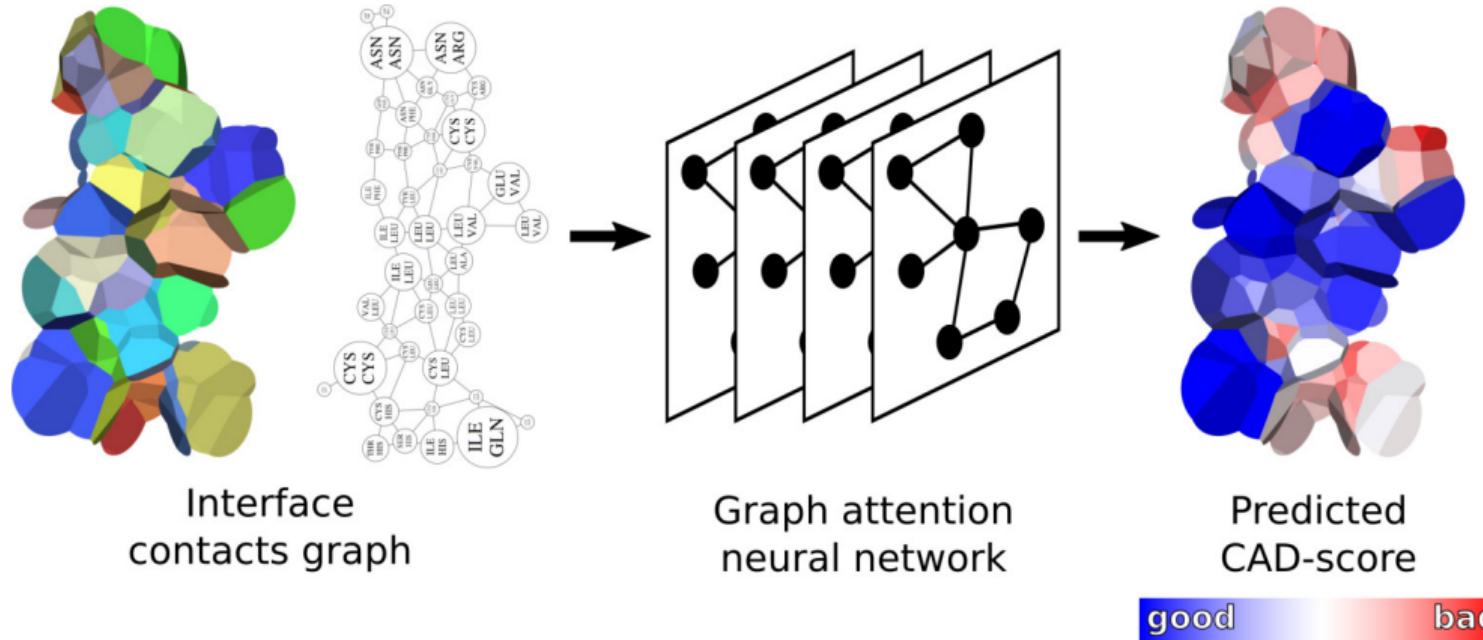


Interface
pseudo-energy



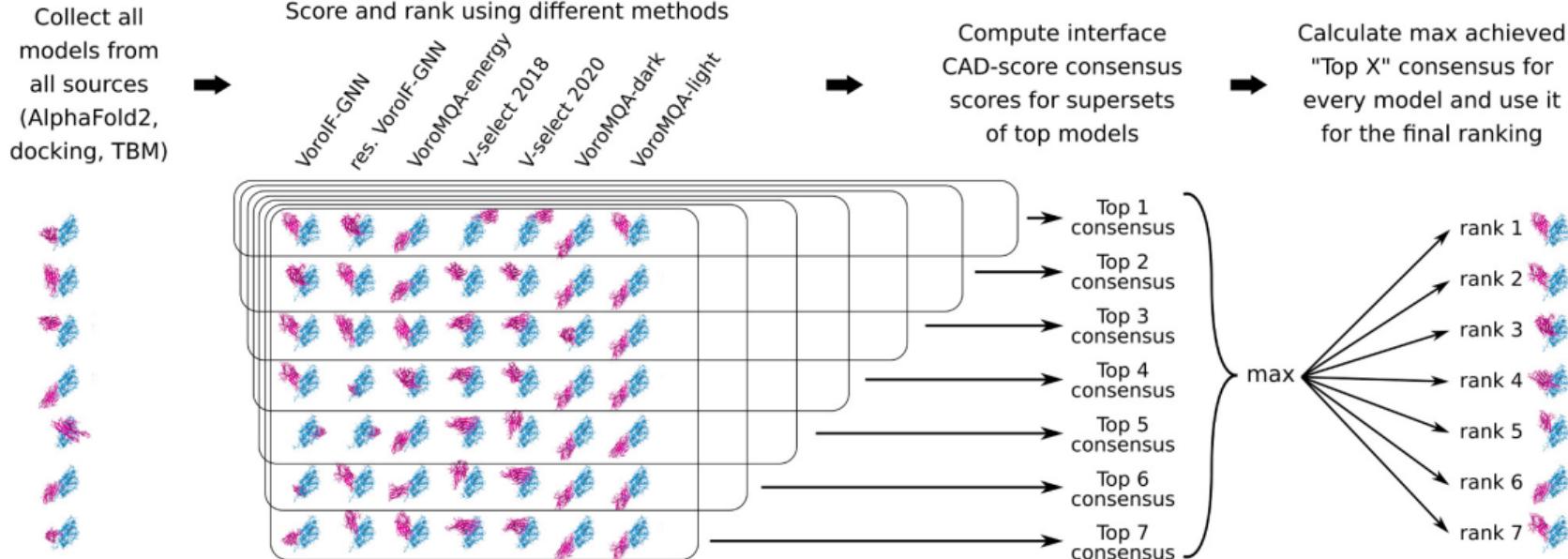
Olechnovič and Venclavas. *VoroMQA: Assessment of protein structure quality using interatomic contact areas*. Proteins (2017)

Sąveikų veritinimas naudojant grafų neuroninj tinklą (pvz. VorolF-GNN)



Olechnovič and Venclovas. *VorolF-GNN: Voronoi tessellation-derived protein-protein interface assessment using a graph neural network*. Proteins (2023)

Geriausių kompleksų modelių atrinkimas naudojant kelis jverčius



Olechnovič, Banciuļ, Dapkūnas, Venclovas Č. *FTDMP: A Framework for Protein-Protein, Protein-DNA, and Protein-RNA Docking and Scoring*. Proteins (2025)

Aklas testavimas struktūrinėje bioinformatikoje

Nežinomos struktūros baltymo seką

MKLTLKNLSMAIMMSIVMGS
SAMAADSNEKMLVNGAS
GYLPEHTLF
ADYLEQD
LHDHYLDI
DRARKDG
DEIKSLKF
QTYPGRFPMSGK
HTFEEELIEFVQGLNHSTGK
NIGIYPEIKAPWFHQEGKDI
AAKTLEVLLKKYGYTGKDDKV

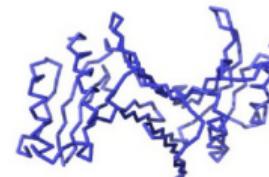
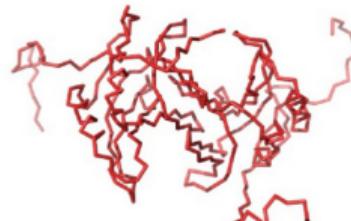


Eksperimentatoriai



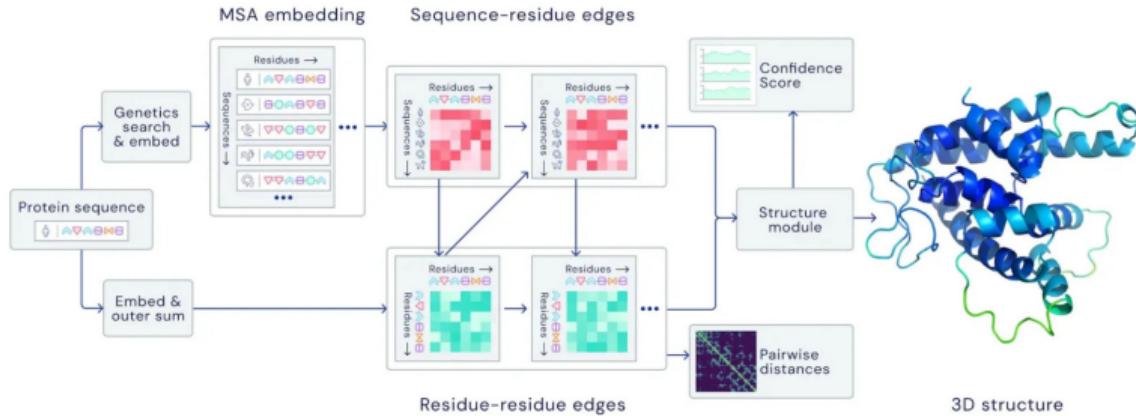
Bioinformatikai

Struktūrų modelių palyginimas

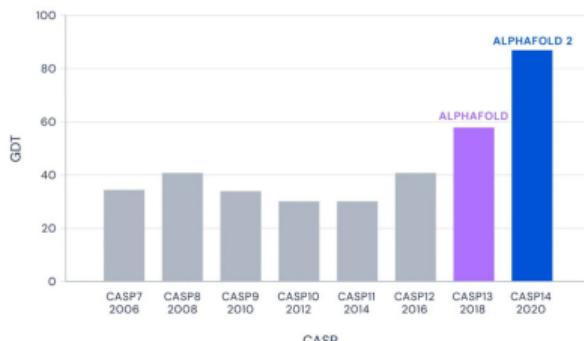


2020 m. revoliucija struktūrų nusakyme

AlphaFold2



Median Free-Modelling Accuracy



Google DeepMind su AlphaFold2 (AF2) metodu padarė revoliuciją balytymų struktūrų nusakyme.

Struktūrinė bioinformatika gavo didžiulį postūmį, patikimų struktūrinių modelių duomenų apimtis išaugo tūkstančius kartų.

2024 m. DeepMind mokslininkai gavo Nobelio premiją už AF2.

VU GMC komandos pasiekimai aklo testavimo eksperimentuose

CASP (Critical Assessment of Techniques for Protein Structure Prediction) ir CAPRI (Critical Assessment of Predicted Interactions) yra tarptautiniai eksperimentai skirti baltymų struktūrinės bioinformatikos metodams aklių testuoti.

Po
AF2

2024 Aukščiausi rezultatai CASP16-CAPRI struktūrų vertinimo eksperimente. Grupė "Olechnovic".

2024 Aukščiausi rezultatai CAPRI eksperimento 47–55 etapuose. Grupė "Venclovas", nariai: Dapkūnas J, Olechnovič K, Venclovas Č.

2022 Vieni iš aukščiausių rezultatų CASP-CAPRI eksperimente ir CASP15 eksperimento oligomerinių struktūrų modeliavimo kategorijoje. Grupė "Venclovas", nariai: Olechnovič K, Dapkūnas J, Venclovas Č.

2022 Vieni iš aukščiausių rezultatų CASP15 eksperimento struktūrų kokybės vertinimo kategorijoje, taip pat aukščiausi rezultatai CASP-CAPRI struktūrų vertinimo eksperimente. Grupės "Venclovas" ir "VorolF".

2020 Vieni iš aukščiausių rezultatų CASP-CAPRI eksperimente ir CASP14 eksperimento oligomerinių struktūrų modeliavimo kategorijoje. Grupė "Venclovas", nariai: Olechnovič K, Dapkūnas J, Venclovas Č.

2019 Vieni iš aukščiausių rezultatų CAPRI eksperimento 38–45 etapuose. Grupė "Venclovas", nariai: Dapkūnas J, Kairys V, Olechnovič K, Venclovas Č.

Prieš
AF2

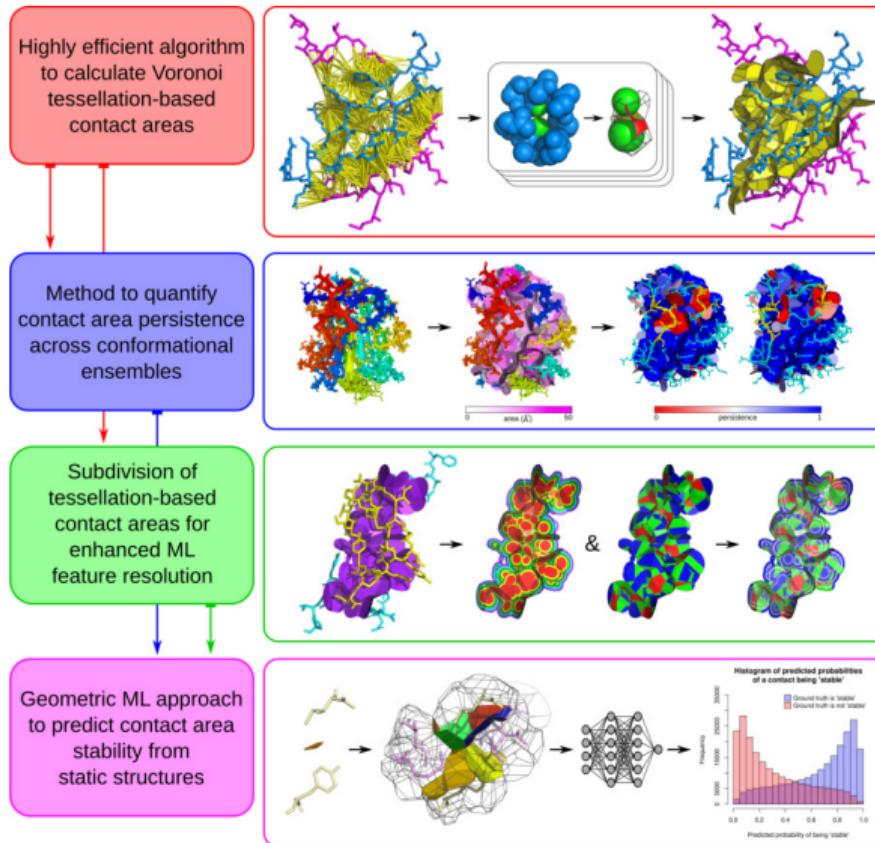
2018 Aukščiausi rezultatai CASP-CAPRI eksperimente ir CASP13 eksperimento oligomerinių struktūrų modeliavimo kategorijoje. Grupė "Venclovas", nariai: Dapkūnas J, Olechnovič K, Venclovas Č.

2018 Vieni iš aukščiausių rezultatų CASP13 eksperimento struktūrų kokybės vertinimo kategorijoje. Grupės "VoroMQA-A" ir "VoroMQA-B".

2016 Aukščiausi rezultatai CASP-CAPRI eksperimente. Grupė "Venclovas", nariai: Dapkūnas J, Olechnovič K, Venclovas Č.

2016 Vieni iš aukščiausių rezultatų CASP12 eksperimento monomerinių struktūrų modeliavimo kategorijoje. Grupė "VoroMQA-select".

Paskutinio mokslinio projekto apžvalga



Mano motyvacija

Norėčiau prisijungti prie sėkmingos LMAJA veiklos keliose kryptyse:

- ▶ Dalijimasis mokslinėmis kompetencijomis
- ▶ Jaunujų mokslininkų rėmimas
- ▶ Mokslo sklaida visuomenei
- ▶ Ekspertinė veikla
- ▶ Tarptautinis bendradarbiavimas

Ačiū.