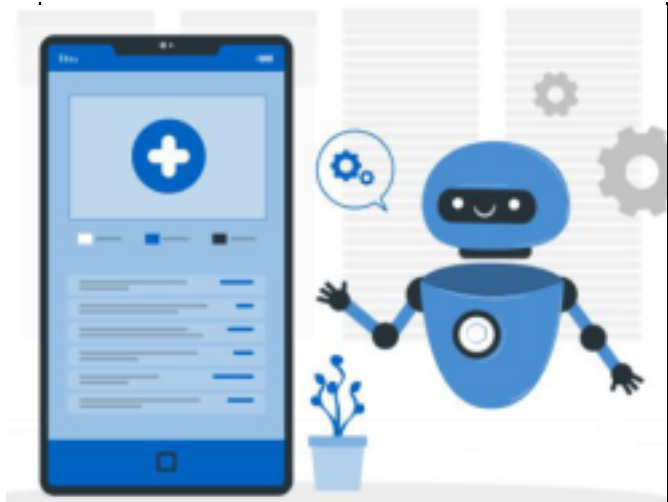

Jednorázové projekty

Dokončené

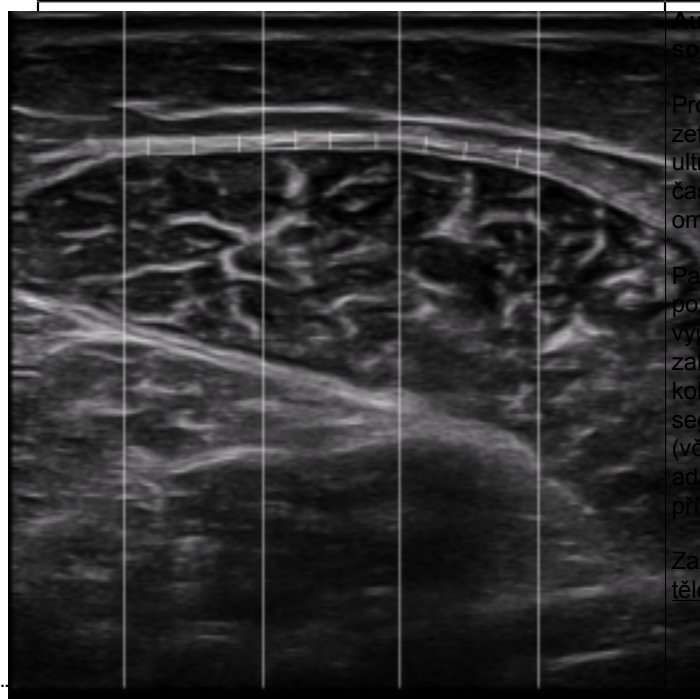
	Zprovoznění výukového softwaru NEST na fakulním HPC clusteru Pro Karolínu Korvasovou a výuku předmětu Úvod do výpočetní neurovědy na MFF UK jsme realizovali nasazení a integraci simulačního softwaru NEST Desktop a NEST Simulator do fakulní výpočetní infrastruktury. Řešení umožňuje studentům pracovat s grafickým rozhraním i Jupyter notebooky přímo na univerzitním HPC clusteru, bez závislosti na externích evropských infrastrukturách. Součástí práce byla integrace do JupyterHubu, provoz přes SLURM, kontejnerizace pomocí Apptaineru, úpravy proxy vrstvy a řešení bezpečnostních a XSRF problémů při komunikaci mezi NEST Desktopem, NEST Serverem a JupyterHubem . Zadavatel: Karolína Korvasová, M.Sc., Dr. rer. nat., Skupina výpočetních neurověd, MFF UK
	Provoz softwaru Origin na Linuxu pro vědecké zpracování dat Pro Katedru fyziky kondenzovaných látek jsme řešili problém používání analytického softwaru <u>Origin</u> v prostředí Linux, které je standardně doporučováno pro vědeckou práci a přístup k HPC clusterům, přestože samotný software nemá nativní linuxovou verzi. Cílem bylo umožnit linuxovým uživatelům plnohodnotnou práci s daty a zachovat kompatibilitu s existujícími projekty a spoluprací napříč výzkumnými skupinami. <u>kam to vede</u> Zadavatel: doc. RNDr. Karel Carva, PhD., <u>Katedra fyziky a kondenzovaných látek, MFF UK</u>
	Kontejnerizace a snadná instalace GBTOlib a UKRmol + Pro tým Zdeňka Mašína jsme připravili distribuci výpočetních kódů GBTOlib a UKRmol (UKRmol-in/UKRmol-out), aby byly použitelné i pro uživatele bez zkušeností s kompilací a linkováním. Cílem bylo odstranit bariéru složitého buildu (BLAS/LAPACK, OpenMPI, SCALAPACK/ELPA aj.) a dodat reprodukovatelné prostředí pro release. By dodán 1) build přes Conda/Mambu včetně úprav CI na GitLabu a doplněné dokumentace, a (2) hotové kontejnery (Docker ? Apptainer) vhodné pro provoz na clusteru Chiméra, včetně návodů na spouštění přes SLURM.

	Součástí bylo i zajištění dvojí kompilace (double + quad precision) a workflow pro testování pomocí ctest. Zadavatel: Mgr. Zdeněk Mašín, Ph.D., <u>Ústav teoretické fyziky, MFF UK</u>
	Analýza single-cell dat (scRNA-seq) Pro tým Adama Klocperka jsme zpracovali experimentální data z moderní metody, která sleduje aktivitu genů v jednotlivých buňkách. Původní data obsahovala několik technických problémů (špatně spárované vzorky, chybějící značení pacientů, část nekvalitních buněk), které bylo nutné nejprve opravit. Provedli jsme kompletní vyčištění dat, odstranění nekvalitních buněk a následné rozdělení buněk podle skutečných pacientů pomocí genetických informací. Data z různých měření jsme sjednotili tak, aby šla smysluplně porovnávat, a automaticky jsme přiřadili jednotlivým buňkám jejich typ (např. různé druhy T-lymfocytů). Výsledkem je přehledně zpracovaný dataset připravený pro biologickou interpretaci a další výzkum. Součástí projektu bylo také vytvoření interního nástroje (AI asistenta), který pomáhá s přípravou analýz a technických reportů. Zadavatel: doc. MUDr. Adam Klocperk, Ph.D., <u>Ústav Imunologie, 2. LF UK</u>
	Webové rozhraní pro analýzu rizik (CLIP) Pro tým CLIP jsme vytvořili jednoduché webové rozhraní pro sledování vývoje rizik v čase. Uživatel do aplikace nahraje vyhodnocené tabulky rizik (FMEA) za jednotlivé roky (např. 2024, 2025, 2026) a systém automaticky zobrazí přehledné grafy znázorňující změny rizikovosti v průběhu let. Cílem bylo nahradit ruční práci s tabulkami a grafy a umožnit rychlé a srozumitelné vyhodnocení trendů. Aplikace je navržena tak, aby ji mohli používat i ne-technicky orientovaní uživatelé, a je dostupná v české verzi podle požadavků zadavatele. Zadavatel: Mgr. Jan Stuchlý, Ph.D., <u>Childhood Leukemia Investigation Prague (CLIP)</u>
	AI pipeline pro zpracování lékařských zpráv Vyvinuli jsme AI nástroj pro převod odborných lékařských zpráv do srozumitelné češtiny pro pacienty. Systém funguje jako pipeline: vstupem je původní medicínský text, výstupem strukturované a jazykově zjednodušené shrnutí při zachování faktické správnosti. Řešení kombinuje rozsáhlou znalostní bázi (MKN-10, databáze léčiv, zkratky aj.) s algoritmem pro vyhledávání termínů (Aho–Corasick) a velkým jazykovým modelem Qwen2.5 pro generování textu. Používáme few-shot prompting a řízené parametry generování pro vyšší konzistenci výstupu. Cílem bylo vytvořit kontejnerizovanou službu připravenou pro on-premise nasazení ve



zdravotnickém prostředí, s důrazem na rozšiřování znalostní báze a odbornou kontrolu správnosti výstupů.

Zadavatel: doc. RNDr. Karel Fišer, Ph.D., 2. Lékařská fakulta UK



Automatizace měření tloušťky hluboké fascie ze sonografických snímků

Pro Kliniku rehabilitace navrhujeme nástroje pro zefektivnění měření tloušťky hluboké fascie na ultrazvukových (sono) snímcích. Cílem projektu je snížit časovou náročnost, zvýšit reprodukovatelnost měření a omezit subjektivní vliv obsluhy.

Paralelně vyvíjíme dvě řešení. První rozšiřuje ImageJ pomocí vlastního makra a implementuje automatizované výpočty tloušťky z připravené masky (včetně variant založených na distance transform, skeletonu a kolmých řezech). Druhé řešení využívá moderní segmentační modely typu Segment Anything Model (včetně experimentů s verzí SAM3 a medicínskými adaptacemi) pro poloautomatickou segmentaci fascie přímo z neoznačených snímků.

Zadavatel: Mgr. Adéla Quittková, Klinika rehabilitace a tělovýchovného lékařství 2. LF UK a FN Motol

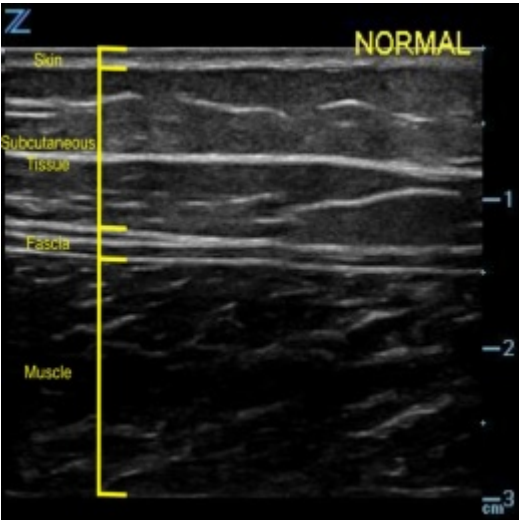


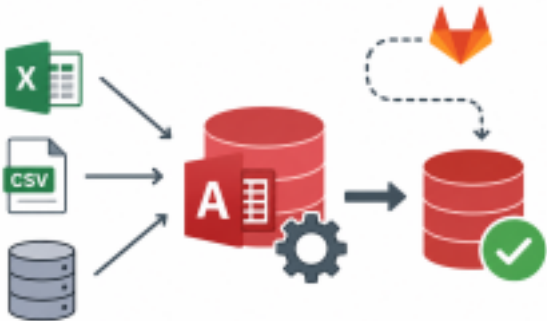
Bezpečné nasazení Sensitive Cloud pro práci s citlivými daty

Pro tým Jakuba Drápala připravujeme workflow pro předzpracování citlivých právních dat v prostředí Sensitive Cloud tak, aby surová data zůstala v izolaci (read-only) a ven odcházely pouze schválené, anonymizované výstupy.

Klíčovou částí je offline distribuce prostředí pro R a Python: kompletní sady knihoven sestavujeme a testujeme mimo cloud (conda-lock/CI), připravujeme jako read-only archivy (conda-pack) a do Sensitive Cloudu nasazujeme jako hotové verze bez možnosti ad-hoc instalací. Součástí je i zprovoznění uživatelského desktopu (RStudio/Jupyter/VS Code) a řešení bezpečného přenosu dat přes S3 a schvalovací proces.

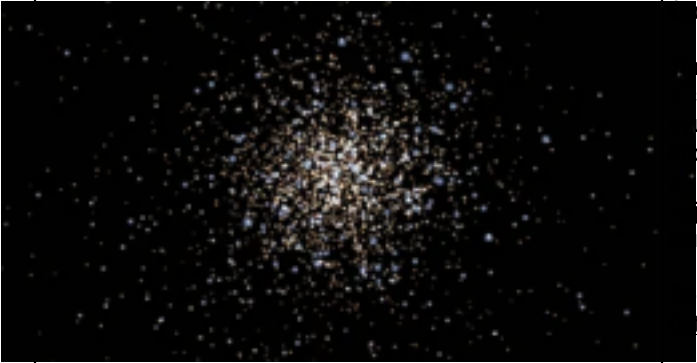
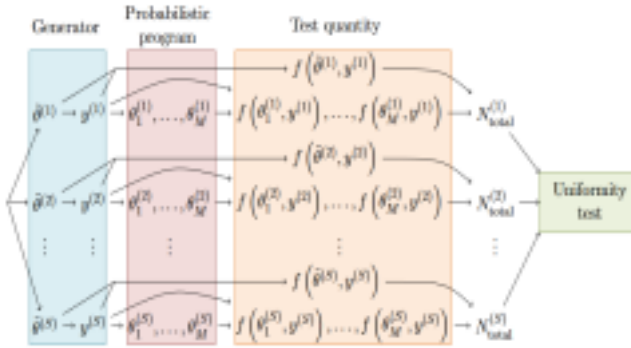
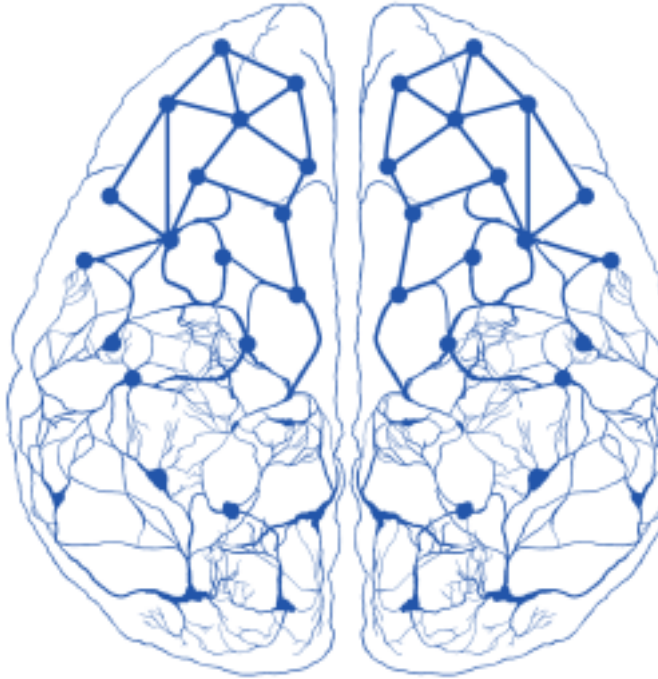
Zadavatel: doc. JUDr. Jakub Drápal, M.Phil., Ph.D., Právnická fakulta UK

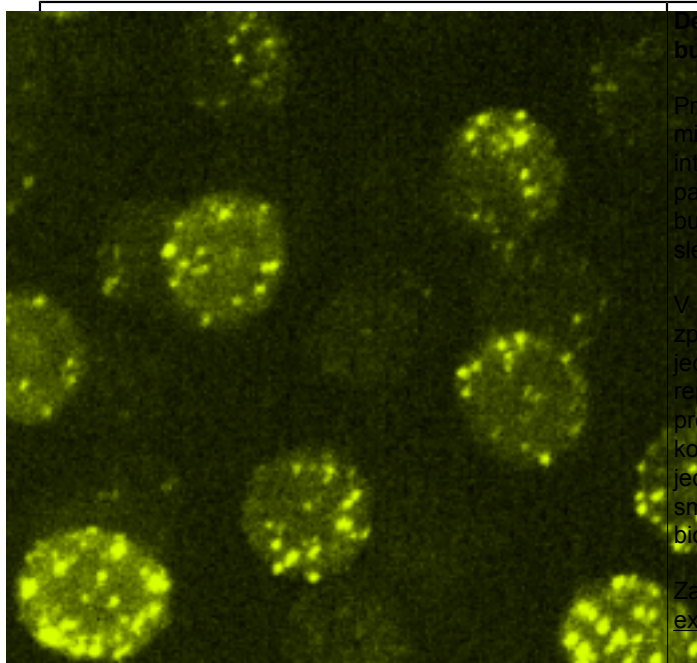
	Webová platforma pro studii Vojtovy metody (SymBaby) Pro Kliniku rehabilitace 2. LF UK a FN Motol navrhujeme a vyvíjíme webovou platformu pro multicentrickou studii terapie Vojtovou metodou. Systém má umožnit sběr a správu citlivých dat napříč několika pracovišti při zachování požadavků na GDPR, auditovatelnost a bezpečné ukládání dat. Připravujeme prototyp aplikace s formuláři, správou uživatelů a logováním změn, včetně návrhu architektury umožňující fyzické uložení dat ve FN Motol a řízený přístup externích pracovišť. Součástí je i řešení budoucího nasazení (inspirace platformou REDCap) a vyjasnění provozního modelu a odpovědnosti za infrastrukturu Zadavatel: Mgr. Adéla Quittková, Klinika rehabilitace a tělovýchovného lékařství 2. LF UK a FN Moto
	Implementace WGS pipeline do TSPS Rozšiřujeme Triple S Pipeline System (TSPS) o kompletní workflow pro analýzu celogenomového sekvenování (WGS) podle metodiky publikované v Nature. Cílem je sjednotit desítky specializovaných bioinformatických nástrojů (např. BWA-MEM, Mutect2, Manta) do jednoho automatizovaného a reprodukovatelného procesu. Pipeline zpracuje surová sekvenační data, najde genetické změny (bodové mutace, větší přestavby genomu), vyhodnotí jejich význam a připraví přehledné výstupy pro další biologickou nebo klinickou interpretaci. Výsledkem je škálovatelná infrastruktura, která umožňuje spolehlivě analyzovat velké genomické datasety bez ručního skládání jednotlivých kroků. Zadavatel: Mgr. Jan Stuchlý, Ph.D., Childhood Leukemia Investigation Prague (CLIP)
	Autotracking skluzu aponeurózy v lýtkovém svalu Pro výzkumný tým z oblasti rehabilitace vyvíjíme nástroj pro automatické sledování pohybu horní a dolní vrstvy svalu (aponeurózy) z ultrazvukového videa. Současně se pohyb hodnotí ručním trackováním jednoho bodu na každé vrstvě snímek po snímku, což je velmi časově náročné a nepřesné. Cílem je vytvořit poloautomatický software, který umožní sledovat více bodů současně nebo analyzovat pohyb celé oblasti pomocí metod optického toku (např. Lucas–Kanade method či Farnebäck). Výstupem je kvantitativní popis relativního pohybu obou vrstev, který může sloužit jako biomarker pro výzkum i budoucí klinickou diagnostiku. Zadavatel: Mgr. Jakub Jačisko, Klinika rehabilitace a tělovýchovného lékařství 2. LF UK a FN Motol
	Webové rozhraní pro prohlédávání egyptologických dat

	Projekt pro vývoj webového rozhraní pro prohledávání kurátorského datasetu o zastoupení žen ve starověkém Egyptě, který aktuálně obsahuje přes 2 100 ručně ověřených záznamů. Rozhraní umožňuje jednoduché fulltextové vyhledávání a filtrování podle sloupců, čímž zpřístupňuje data výzkumníkům a studentům bez nutnosti znalosti SQL. Data jsou hostována Univerzitou Karlovou a počítá se s jejich budoucím rozšiřováním. Platforma poskytuje flexibilní nástroj pro výuku i výzkum v egyptologii a umožňuje v budoucnu případnou integraci dalších záznamů a pokročilých dotazů. Zadavatel: Susan Anne Kelly, Ph.D. <u>Český egyptologický ústav FF UK</u>
	Zpracování aktualizace dat o léčivech v Microsoft Access Projekt zaměřen na automatizaci zpracování a aktualizaci databáze Microsoft Access využívané pro správu medicínských dat. Cílem bylo nahradit manuální postup spolehlivým nástrojem, který výrazně zkrátí čas potřebný pro pravidelné aktualizace a současně omezí riziko lidských chyb. Výsledkem projektu je aplikace pro automatizované zpracování aktualizací dat doplněná o dokumentaci pro koncové uživatele. Součástí řešení je mechanismus pro distribuci nových verzí přímo z GitLabu, který usnadňuje budoucí údržbu a nasazování dalších úprav. Zadavatel: prof. MUDr. Petra Lišková, M.D., Ph.D. <u>Klinika pediatrie a dědičných poruch metabolismu 1. LF UK</u>

Rozpracované

	Nasazení JATOS a LimeSurvey na univerzitní infrastrukturu Pro potřeby FF UK připravujeme návrh a ověření nasazení výzkumných nástrojů pro online experimenty a sběr dat (JATOS, LimeSurvey) na sjednocené infrastrukturu. Cílem je umožnit jejich spolehlivý a dlouhodobě udržitelný provoz pro širší akademickou komunitu. Součástí práce je analýza stávajících nasazení (VM, zatížení, správa dat), návrh kontejnerizace (Docker) a orchestrace v Kubernetes, řešení sdíleného úložiště a externích databází, a ověření škálování a provozních omezení jednotlivých nástrojů.
---	--

	Zadavatel: Mgr. Ondřej Tichý, Ph.D., Ústav lingvistiky FF UK
	Optimalizace thread managementu pro NBODY6/7 Tento projekt se zaměřuje na zlepšení správy threadů v simulačním kódu NBODY6/7 s cílem efektivnějšího využití výpočetních zdrojů. Součástí je také vylepšení specializace počtu vláken pomocí parametrů programu a správné nastavení afinity při spuštění. Cílem je zajistit stabilnější a předvídatelnější výkon při výpočetně náročných astrofyzikálních simulacích. Zadavatel: doc. RNDr. Ladislav Šubr, Ph.D. Astronomický ústav UK
	Simulation-Based Calibration (SBC) pro validaci bayesovských modelů v Pythonu Projekt zaměřen na vývoj moderní Python implementace metody Simulation-Based Calibration (SBC) pro validaci bayesovských modelů. Cílem je vytvořit modulární a rozšiřitelnou architekturu, která překoná omezení stávajících implementací a umožní efektivní práci s různými bayesovskými frameworky, jako jsou PyMC, Bambi nebo NumPyro. Implementace podporuje paralelní zpracování simulací, robustní práci s chybami, integraci s knihovnou ArviZ a rozšířené diagnostické i vizualizační nástroje včetně ECDF grafů známých z referenční implementace v jazyce R. Výsledkem je open-source nástroj určený pro výzkumné využití i další rozvoj komunitou kolem bayesovského modelování. Zadavatel: Mgr. Martin Modrák, Ph.D. Ústav bioinformatiky 2.LF UK
	Optimalizace MOZAIC pro HPC výpočty v neuroscience Projekt zaměřen na analýzu a optimalizaci open-source frameworku MOZAIC, který slouží pro simulace biologicky realistických neuronových sítí. Cílem je identifikovat výkonnostní omezení při běhu rozsáhlých simulací na HPC infrastruktuře a navrhnout úpravy vedoucí k efektivnějšímu využití výpočetních prostředků. Součástí projektu je zprovoznění a softwarového řešení zahrnujícího MOZAIC, NEST a PyNN, profilování reálných neuroscientific simulací a analýza jejich chování na různých hardwarových platformách. Na základě spolupráce s vývojáři a uživateli frameworku jsou zkoumány možnosti optimalizace konfigurace, kompilace i samotné architektury aplikace s cílem zkrátit dobu výpočtu a zlepšit škálovatelnost při náročných HPC simulacích. Zadavatel: Mgr. Ján Antolík, Ph.D. Katedra softwaru a výuky informatiky



Detekce intracelulárních patogenů v rostlinných buňkách

Projekt zaměřen na automatizované zpracování mikroskopických snímků rostlinných buněk a detekci intracelulárních struktur souvisejících s přítomností patogenů. Cílem je spolehlivě identifikovat jednotlivé buňky, vytvořit jejich masky a určit počet i polohu sledovaných bodových struktur uvnitř každé buňky.

V rámci projektu jsou porovnávány různé přístupy ke zpracování 2D a 3D obrazových dat, včetně analýzy jednotlivých mikroskopických řezů a jejich sloučených reprezentací. Součástí řešení je návrh efektivního pipeline pro segmentaci buněk, párování detekovaných struktur s konkrétními buňkami a vyhodnocení výpočetní náročnosti jednotlivých metod. Projekt využívá také GPU akceleraci a směřuje k vytvoření praktického nástroje použitelného při biologickém výzkumu.

Zadavatel: Mgr. Adéla Přibyllová, Ph.D. Katedra experimentální biologie rostlin, PŘF UK