

Andreas Reuter Senior Professor at Heidelberg University



HITS Managing Director Prof. Andreas Reuter has been appointed senior professor of Heidelberg University. In October he took over the task of developing the IT infrastructure of Heidelberg University in cooperation with other research institutions in the region with a focus of the requirements of data-driven science. He will work closely with all involved organizations over the next three years. Until his retirement, Andreas Reuter held the endowed chair "Distributed Systems" (supported by the Klaus Tschira Foundation) at Heidelberg University.

Heidelberg University bestows the title of senior professorship on excellent researchers and lecturers. With these appointments, the University aims to benefit from the wealth of experience of retired professors. Andreas Reuter is Managing Director of the HITS Stiftung (Foundation) and is deputy chair of the Heidelberg Laureate Forum Foundation.

In honor of his contributions to research and to science policy, HITS organized a scientific symposium at the Studio Villa Bosch on November 27. One of the keynote speakers was **Prof. Michael Stonebraker** (MIT, Cambridge/MA, USA), winner of the 2014 Turing Award.

HITS

Humboldt Fellow Simulates the Death of Stars



Dr. Samuel Jones (University of Victoria, Canada) has been working at HITS since May 2015 as a visiting scientist. The Alexander von Humboldt foundation awarded Dr. Jones a Humboldt Research Fellowship for two years. This allows him to carry out a research project with an academic host in Germany. Samuel Jones was invited by **Prof. Friedrich Röpke**, head of the Physics of Stellar Objects (PSO) research group. He will stay at HITS until April 2017, investigating the role of so-called "light massive stars" in the Universe.

New Visiting Scientists

Fulbright fellow **Lee Rosenthal** has been a visiting scientist in the TAP group since the end of September. In October the following visiting scientists came to HITS: **Csaba Daday** (seconded from the IWR) to the MBM Group, **ER Azhagiya Singam** from CLRI Chennai, India, to the MCM group, DAAD fellow **Sebastián Bustamante Jaramillo** from the University of Antioquia, Columbia, to the TAP group, and **Rebecca Harris** (University of Washington, USA) to the SCO group. In November, **Mario Gundic** (University of Zagreb, Croatia) arrived for a short stay in the MCM group, and **Svenja Jacob**, a fellow of the State Research Training Group "astrophysics of cosmological probes of gravity on large scales", joined the TAP group.

HITSTERS

New Staff Members

In October, the following new employees joined HITS: **Dr. Ana Peón-Nieto** as a postdoc and **Florian Stecker** as a doctoral student in the GRG group, **Patrick Schmidt** on predocoral scholarship in the CST group, and **Dr. Peter Zaspel** as a postdoc in the DMQ group. In November, **Dr. Vedran Miletic** joined the MBM Group as a postdoc and **Dr. Mark-Christoph Müller** rejoined the NLP group as a research associate.

In "Cell": Floppy But Fast



Inside cells, communication between the nucleus, which harbours our genetic material, and the cytoplasm is mediated by the constant exchange of thousands of signaling molecules and proteins. Until now, it was unknown how this protein traffic can be so fast and yet precise enough to prevent the passage of unwanted molecules. Through a combination of computer simulations and various experimental techniques, researchers from Germany, France and the UK have solved this puzzle: A very flexible and disordered protein can bind to its receptor within billionths of a second. HITS researchers **Prof. Frauke Gräter** and **Dr. Davide Mercadante** (both MBM group) participated in this study that was published in the journal "Cell" in October. Since around 30-50% of the proteins in human cells are fully or partially disordered, the results may also provide a general rationale for how information can be transmitted very fast - which is vital to cell survival.

RESEARCH

When the Label Matters

Fluorescent labels are often attached to proteins in order to experimentally study their binding and adsorption properties. In an article in the journal "Nano Letters" by **Dr. Julia Romanowska**, **Dr. Daria Kokh** and **Prof. Rebecca Wade** (MCM group), computations were used to evaluate the influence of label attachment on an adsorption process of a protein to a charged surface. Although the modified protein had a relatively small fluorescent label attached, it was found that this changes the protein's surface charge distribution, which then disrupts the adsorption onto a charged surface. Therefore, it is important when interpreting the results of experiments with labelled proteins, that both protein species are accounted for. This can be done quite easily with relatively straightforward computational methods, as shown in the article that was published in November.

PORTRAIT



The list of his professional affiliations is stunning: Since his PhD in theoretical physics in Oxford in 1970, Tony Hey has been working in many positions in physics and computer science. After post doc years at the Caltech, he moved to Geneva to become a fellow at CERN. In the 80s, after fellowships and professorships at MIT and Caltech, Tony Hey switched from particle physics to computer science and became Professor of Computation at the University of Southampton. His research interests lie in parallel and quantum computing. Besides academia, he has taken on other assignments. He led the UK's e-Science Program from 2001 to 2005. Then he went to Microsoft in Seattle and his last assignment there was as Corporate Vice President of Microsoft Research until 2014. After a sabbatical year at the eScience Institute at the University of Washington, in 2015 he has taken on the role of Chief Data Scientist at the UK's Science and Technology Facilities Council. Tony Hey has authored or co-authored a number of books including *The Fourth Paradigm* and *The New Quantum Universe*, and *Einstein's Mirror*. His latest book is *The Computing Universe - A Journey through a Revolution*. Since 2014, he has been a member of the HITS Scientific Advisory Board (SAB).

Dr. Heribert Knorr, HITS Scientific Advisory Board



Heribert Knorr studied political science, sociology, history and English at the universities of Tübingen and Newcastle-upon-Tyne. After the State Examination, he wrote his dissertation on a constitutional law topic, supervised by Professor Theodor Eschenburg. Subsequently, he worked in the administration of the University of Tübingen, and then in the state of Baden-Württemberg's parliament, Ministry of Science, Research and the Arts, as well as its Ministry of State. From 1991 until 2013, he served in the Ministry of Science, Research and the Arts as Director General responsible for research, technology transfer, digitalization and international cooperation. In this position, he collaborated with Klaus Tschira and Andreas Reuter on several projects and supported the founding and the development process of HITS. Since 2014, Heribert Knorr has been a member of the HITS SAB.

NR. 21 | 12-2015

Heidelberger Institut für
Theoretische Studien

HITS

THE CHARTS

Andreas Reuter Seniorprofessor der Uni Heidelberg



HITS-Geschäftsführer Prof. Dr. Andreas Reuter ist zum Seniorprofessor der Ruperto Carola ernannt worden. Seit Oktober hat er die Aufgabe übernommen, in den kommenden drei Jahren die IT-Infrastruktur an der Universität Heidelberg in Kooperation mit den Forschungseinrichtungen der Region weiterzuentwickeln. Dabei geht es insbesondere um die Anforderungen, die sich aus der sogenannten datengetriebenen Wissenschaft ergeben. Dazu wird er eng mit den beteiligten Organisationen zusammenarbeiten. Bis zu seinem Eintritt in den Ruhestand war er an der Fakultät für Mathematik und Informatik Inhaber einer von der Klaus Tschira Stiftung geförderten Professor für Verteilte Systeme.

Die Universität Heidelberg vergibt den Ehrentitel Seniorprofessor an ausgezeichnete Forscher und akademische Lehrer. Mit ihrer Ernennung verfolgt die Universität das Ziel, den reichen Erfahrungsschatz emeritierter oder im Ruhestand befindlicher Professoren weiter aktiv zu nutzen. Neben seinem Engagement für das HITS gehört Andreas Reuter dem Vorstand der HITS-Stiftung an und ist stellvertretender Vorstandsvorsitzender der Heidelberg Laureate Forum Foundation.

Das HITS würdigte seine Beiträge zu Forschung und Forschungspolitik mit einem wissenschaftlichen Symposium im Studio Villa Bosch am 27. November. Dort hielt unter anderem auch der Preisträger des Turing Award 2014, **Prof. Michael Stonebraker** (MIT, Cambridge/USA), eine Rede.

HITS



Humboldt-Stipendiat simuliert den Tod der Sterne



Seit Mai 2015 arbeitet **Dr. Samuel Jones** (University of Victoria, Kanada) am Heidelberger Institut für Theoretische Studien (HITS) als Gastwissenschaftler. Das Alexander von Humboldt-Stipendium ermöglicht Forschern, ein selbst gewähltes langfristiges Vorhaben in Kooperation mit einem selbst gewählten wissenschaftlichen Gastgeber an einer Forschungseinrichtung in Deutschland durchzuführen. Samuel Jones wurde von **Prof. Friedrich Röpke**, Leiter der Forschungsgruppe Physik Stellarer Objekte (PSO), eingeladen. Er wird bis April 2017 am HITS bleiben, um die Rolle der sogenannten „leichten massereichen Sterne“ im Universum zu untersuchen.

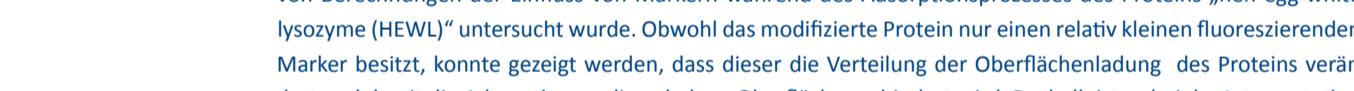
Neue Gastwissenschaftler

Seit Ende September ist **Lee Rosenthal** mit einem Fulbright-Stipendium Gastwissenschaftler in der TAP-Gruppe. Im Oktober kamen folgende Gastwissenschaftler ans HITS: **Csaba Daday** (abgeordnet vom IWR) zur MBM-Gruppe, **E. R. Azhagiya Singam** vom CLRI Chennai, Indien, zur MCM-Gruppe, **Sebastián Bustamante Jaramillo** von der Universidad de Antioquia, Kolumbien, als DAAD-Stipendiat zur TAP-Gruppe, und **Rebecca Harris** (University of Washington, USA) zur SCO-Gruppe. Im November stießen **Mario Gundic** (Universität Zagreb, Kroatien) zur MCM-Gruppe und **Svenja Jacob**, Stipendiatin des Landesgraduiertenkollegs „Astrophysics of cosmological probes of gravity on large scales“, zur TAP-Gruppe hinzu.

Neue Mitarbeiter

Im Oktober kamen folgende neue Mitarbeiter ans HITS: **Dr. Ana Peón-Nieto** als Postdoc und Doktorand **Florian Stecker** zur GRG-Gruppe, **Patrick Schmidt** als Doktorand und Stipendiat zur CST-Gruppe und **Dr. Peter Zaspel** als Postdoc zur DMQ-Gruppe. Seit November arbeiten **Dr. Vedran Miletic** als Postdoc in der MBM-Gruppe und **Dr. Mark-Christoph Müller** als wissenschaftlicher Mitarbeiter in der NLP-Gruppe.

HITS KÖPFE



In „Cell“: Der Schlüssel zur Proteinbindung - ungeordnet, aber ultraschnell



Die Kommunikation in Zellen zwischen dem Zellkern, der unser wertvolles genetisches Material beherbergt, und dem Zellplasma wird durch den dauerhaften Austausch von Tausenden von Signalmolekülen und Proteinen vermittelt. Bisher war unbekannt, warum dieser Proteinverkehr zugleich so schnell und doch exakt genug ist, um unerwünschte Moleküle an der Passage zu hindern. Durch eine Kombination von Computersimulationen und verschiedenen experimentellen Techniken haben Forscher aus Deutschland, Frankreich und Großbritannien dieses Rätsel gelöst: Ein sehr bewegliches Protein kann an seinen Rezeptor innerhalb von milliardstel Sekunden binden. Die Arbeit, an der die beiden HITS-Forscher **Prof. Frauke Gräter** und **Dr. Davide Mercadante** (beide MBM-Gruppe) maßgeblich beteiligt waren, wurde im Oktober in der Fachzeitschrift „Cell“ veröffentlicht. Da dreißig bis fünfzig Prozent der Proteine in menschlichen Zellen ungeordnet sind, könnten die Forschungsergebnisse auch eine Erklärung dafür liefern, warum Informationen so schnell weitergeleitet werden – eine unerlässliche Voraussetzung für das Überleben der Zelle.

Wenn die Markierung entscheidet

Fluoreszierende Marker werden häufig an Proteinen angefügt, um experimentell ihre Bindung und Adsorption, das heißt die Anlagerung an flachen Oberflächen zu untersuchen. Ein Artikel in der Fachzeitschrift „*Nano Letters*“ von **Dr. Julia Romanowska**, **Dr. Daria Kokh** und **Prof. Rebecca Wade** (MCM-Gruppe) beschreibt, wie mit Hilfe von Berechnungen der Einfluss von Markern während des Adsorptionsprozesses des Proteins „hen egg white lysozyme (HEWL)“ untersucht wurde. Obwohl das modifizierte Protein nur einen relativ kleinen fluoreszierenden Marker besitzt, konnte gezeigt werden, dass dieser die Verteilung der Oberflächenladung des Proteins verändert und damit die Adsorption an die geladene Oberfläche verhindert wird. Deshalb ist es bei der Interpretation experimenteller Ergebnisse von markierten Proteinen wichtig, dass beide Arten von Proteinen berücksichtigt werden. Dies kann recht einfach mit relativ unkomplizierten, computergestützten Methoden erfolgen, wie der im November erschienene Artikel zeigt.

FORSCHUNG



Prof. Dr. Tony Hey, HITS Scientific Advisory Board



Die Liste seiner beruflichen Aktivitäten ist atemberaubend: Seit er 1970 seine Dissertation in Theoretischer Physik in Oxford abschloss, hat Tony Hey zahlreiche Positionen in Physik und Informatik ausgeübt. Nach seinen Postdoc-Jahren am California Institute of Technology (Caltech) zog Tony Hey als fellow des CERN nach Genf. In den 80-er Jahren, nach Stipendien und Professuren am MIT und am Caltech, wechselte er von der Teilchenphysik zur Informatik und wurde Professor für Informatik an der Universität von Southampton. Seine Forschung konzentriert sich auf Parallel- und Quantencomputing. Tony Hey übernahm auch außeruniversitäre Aufgaben: Von 2001 bis 2005 leitete er das britische e-Science Programm. Anschließend arbeitete er für Microsoft in Seattle, wo er zuletzt bis 2014 als Corporate Vice President für Microsoft Research tätig war. Nach einem Sabbatjahr am eScience Institut der Universität Washington wurde er 2015 Chief Data Scientist des UK Science and Technology Facilities Council. Tony Hey ist Autor und Co-Autor einer Reihe von Büchern, unter anderem *The Fourth Paradigm*, *The New Quantum Universe* und *Einstein's Mirror*. Sein neuestes Buch heißt *The Computing Universe – A Journey through a Revolution*. Tony Hey ist seit 2014 Mitglied des Wissenschaftlichen Beirats des HITS.

Dr. Heribert Knorr, HITS Scientific Advisory Board



Heribert Knorr studierte Politische Wissenschaften, Soziologie, Geschichte und Englisch an den Universitäten Tübingen und Newcastle-upon-Tyne. Nach dem Staatsexamen promovierte er bei Professor Dr. Theodor Eschenburg über ein staatsrechtliches Thema. Nach beruflichen Stationen in der Verwaltung der Universität Tübingen, im Landtag, im Ministerium für Wissenschaft, Forschung und Kunst sowie im Staatsministerium Baden-Württembergs war er von 1991-2013 im Ministerium für Wissenschaft, Forschung und Kunst als Abteilungsleiter verantwortlich für die Bereiche Forschung, Technologietransfer, Digitalisierung und internationale Zusammenarbeit. In dieser Funktion arbeitete in verschiedenen Projekten mit Klaus Tschira und Andreas Reuter zusammen und unterstützte die Gründung und den Aufbau des HITS. Seit 2014 ist Heribert Knorr Mitglied des Wissenschaftlichen Beirats des HITS.

IMPRESSIONUM | DR. PETER SAUERESSIG (VISDP), SAUERESSIG@H-ITS.ORG, TEL. +49 - 6221- 533 245
FOTOS: HITS, GÜLAY KESKİN, TONY HEY | WWW.H-ITS.ORG

PORTRAIT



No 21 | 12-2015

Heidelberg Institute for
Theoretical Studies

HITS

