

No 1-11 | 2010

Heidelberger Institut für  
Theoretische Studien



# THE CHARTS

HITS

HITSKÖPFE

FORSCHUNG

PORTRAIT

NO 1-11 | 2010

Heidelberg Institute for  
Theoretical Studies



# THE CHARTS

HITS

HITSTERS

RESEARCH

PORTRAIT



## Vom Molekül bis zum Universum - Forschung mit dem Computer



Am 8.03.2010 wurde das HITS mit einem Kolloquium feierlich eröffnet. Es ging durch Namensänderung aus dem ehemaligen EML Research hervor. Als Forschungsinstitut der Klaus Tschira Stiftung betreibt es nach wie vor Grundlagenforschung auf Forschungsfeldern, die große Datenmengen verarbeiten und strukturieren. Es wird aber größer und thematisch breiter aufgestellt sein. „HITS wird ein recht multidisziplinäres Institut“, erläuterte Klaus Tschira bei der Eröffnung. Beim Eröffnungskolloquium sprach die renommierte US-Wissenschaftlerin Jeannette Wing (National Science Foundation) zum Thema „Computational Thinking“.

### HITS Partner von CoSyne

Die NLP-Gruppe ist Partner des neuen EU-Projekts CoSyne. 7 Partner aus 5 Ländern arbeiten seit März 2010 daran, den dynamischen Synchronisationsprozess von Wikis in mehreren Sprachen zu automatisieren. Aus Deutschland sind die Deutsche Welle und HITS mit dabei. Die EU fördert das Projekt mit 2,35 Millionen Euro.

### Neue HITS-Gruppen

Die Gruppe Theoretical Astrophysics (TAP) nahm im April ihre Arbeit auf, Gruppenleiter ist Prof. Volker Springel (siehe „Portrait“). Im Oktober etablierte sich die Gruppe „Scientific Computing“ (SCO) unter der Leitung von Dr. Alexandros Stamatakis am HITS.



„Computational Thinking wird als wesentliche Fähigkeit von jedem auf der Welt genutzt werden!“

Prof. Jeannette Wing, National Science Foundation / Carnegie Mellon University, 08.03.2010  
(Foto: NSF / CMU)

HITS

## Knet-Proteine und Schuhkarton-Computer



Der Kindergarten „Pustebume“ in Heidelberg war im März im HITS zu Gast. Im Rahmen des Projektes „Berufswelt der Eltern“ sollen die Kinder den Arbeitsplatz der Eltern kennenlernen. Stefan Richter (MCM), dessen Tochter Julia den Kindergarten besucht, erklärte den Kindern phantasievoll mit Knete und einem Karton, wie Computersimulationen von molekularen Proteinverbindungen funktionieren. Die Kleinen waren begeistert. Einige wollten sogar Biochemiker werden, denn „da darf man dann den ganzen Tag mit Knete spielen!“

**Dr. Rebecca Wade**, MCM-Gruppenleiterin, wurde zum Mitglied der Hartmut Hoffmann-Berling International Graduate School of Molecular and Cellular Biology Fakultät der Universität Heidelberg ernannt.

**Dr. Carsten Baldauf**, Post-Doc in der MBM-Gruppe (Leitung: Dr. Frauke Gräter), hat für seine Arbeit über das vWF-Protein (siehe: Forschung) gleich zwei Preise erhalten: Als einziger Nichtmediziner den „Nachwuchsförderpreis Blutungskrankheiten“ der deutschen Gesellschaft für Thrombose- und Hämostaseforschung, außerdem einen Pier M. Mannucci Young Investigator prize, der für die besten Artikel von Nachwuchswissenschaftlern verliehen wird.

**Dr. Michael Strube**, NLP-Gruppenleiter, und HITS-Alumnus Dr. Simone Ponzetto (Universität Heidelberg) wurden mit dem IJCAI-JAIR „Best Paper Prize 2010“ für ihr Paper über Wikipedia ausgezeichnet. Der Preis wird für herausragende Artikel verliehen, die im Journal of Artificial Intelligence Research (JAIR) in den letzten 5 Jahren veröffentlicht wurden.

**Dr. Outi Salo-Ahen**, seit 2006 in der MCM-Gruppe (Leitung: Dr. Rebecca Wade), ist im Juni in ihre finnische Heimat zurückgekehrt und forscht im Structural Bioinformatics Laboratory an der Åbo Akademi University, Turku.

**Dr. Matthias Stein**, seit 2005 PostDoc in der MCM-Gruppe, hat im Juli eine Stelle als Gruppenleiter am Max-Planck-Institut für Dynamik komplexer technischer Systeme in Magdeburg angetreten. Herzliche Glückwünsche und viel Erfolg!

HITSKÖPFE

## Wenn das Blut zu dick wird

### MBM-Gruppe entdeckt den molekularen Mechanismus für Thrombose und Bluterkrankheit.

Wenn das Blut zu dick oder zu dünn wird, kann das tödliche Folgen für uns haben. Bei zu dickem Blut sammeln sich Proteine an und lassen die Ader verstopfen – es kommt zur Thrombose. Wenn die Ansammlung zu stark abgebaut wird, kann eine Bluterkrankheit vorliegen. Den Ausgleich schafft bei gesundem Blut ein Protein, der sogenannte „von-Willebrand-Faktor“ (vWF). Dieses Protein schwimmt neutral im Blutfluss mit und wird aktiv, wenn ein Blutgefäß verletzt ist und Blut austritt.



**Dr. Frauke Gräter** und ihre Forschungsgruppe „Molecular Biomechanics“ haben mit dem Computer neue Erkenntnisse darüber gewonnen, wie dieses wichtige Protein funktioniert. Die HITS-Forscher beschäftigen sich mit der Auswirkung von mechanischen Kräften auf Prozesse im Körper. „Solche Kräfte, sogenannte Scherkräfte, wirken auch im Blut“, erklärt Frauke. Ihr Mitarbeiter Dr. Carsten Baldauf vergleicht das vWF-Protein mit einem Klebstreifen: „Bei einer Verletzung dehnt sich der Klebstreifen und seine Klebefläche vergrößert sich. Zum Verschließen der Wunde binden sich Proteine und Blutplättchen an diese Klebefläche. Bevor es allerdings zu einer Verstopfung kommt, wird das Klebeband an einer Sollbruchstelle durchgeschnitten.“

Obwohl vWF eines der größten Proteine im Blut ist, haben die Forscher im Labor bislang die „Sollbruchstelle“ nicht gefunden, weil sie im Protein verborgen ist. Mit dem Computer gelang es den HITS-Forschern, die „Sollbruchstelle“ zu entdecken und den Vorgang des Schneidens nachzuvollziehen.

### SSDBM-Konferenz: Intelligente Kanäle gegen die Datenflut



Vom 30. Juni bis 32. Juli fand die 22. International Conference on Scientific and Statistical Database Management (SSDBM) in Heidelberg statt. Die Konferenz mit 80 Teilnehmern aus aller Welt wurde gemeinsam vom Institut für Informatik der Universität Heidelberg (Prof. Michael Gertz) und vom HITS durchgeführt. Prof. Andreas Reuter war Conference Chair, Priv.-Doz. Wolfgang Müller (SDBV-Gruppe) übernahm die Organisation. Hintergrund der Konferenz ist die Verwaltung und Strukturierung der immer weiter wachsenden Menge wissenschaftlicher Daten.

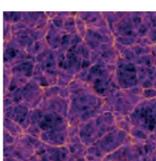
FORSCHUNG

## Volker Springel: „Wir wollen die Dunkle Materie ans Licht bringen.“



Er befasst sich mit einem Thema, das im Experiment nicht zu untersuchen ist: Die Entwicklung des Universums seit dem Urknall. Der Astrophysiker Volker Springel erstellt deshalb Computersimulationen. Er erzeugt ein künstliches Universum und verfolgt damit die Entstehung von Galaxien und Sternen. Sein „Labor“ steht seit März 2010 im HITS. Dort baut er die Gruppe „Theoretical Astrophysics“ (TAP) auf. Die Stelle ist verbunden mit einer Professur für Astrophysik an der Universität Heidelberg, Dienstsitz ist das HITS.

### Das Universum im Computer



Springels Stationen: Physikstudium in Tübingen und Berkeley, Promotion 2000 in München (LMU und MPA), Postdoc in Harvard, 2005-09 Gruppenleiter für Numerische Kosmologie am MPA. Seine Forschungsinteressen: Bildung von Sternsystemen und Schwarzen Löchern sowie Numerische Kosmologie, mit Simulationen, die gewaltige Datenmengen verarbeiten. Nach neuesten Schätzungen besteht mehr als 80% der Masse im All aus Dunkler Materie. Dennoch wurde ihre Existenz bislang noch nicht bewiesen. „Mit unseren Simulationen wollen wir die Dunkle Materie quasi ans Licht bringen“, sagt Volker Springel. Ein erster Schritt hin zu diesem Ziel war die sogenannte „Millenniums-Simulation“: Mit einem künstlichen Universum berechnete er, wie sich das Weltall nach dem Urknall entwickelt, wenn es tatsächlich zum größten Teil aus Dunkler Materie besteht. Das Ergebnis verblüffte: Denn die beobachtete Verteilung der sichtbaren Materie stimmte relativ gut mit der Voraussage der Simulation überein. In diesem Sommer startete Volker Springel die „Millennium XXL“-Simulation, die insgesamt 300 Milliarden Teilchen berechnet, dreißigmal so viel wie in der „Millenniums-Simulation“. Initiiert und getragen wird das Projekt vom Virgo Consortium, einer internationalen Vereinigung von Astrophysikern, die sich kosmologische Simulationen mit Supercomputern auf die Fahnen geschrieben hat. Mehr darüber in den nächsten „HITS Charts“.

IMPRESSUM | DR. PETER SAUERESSIG (ViSDP), SAUERESSIG@HITS.ORG, TEL. +49 - 6221 - 533 245  
FOTOS: BERNHARDT UND PARTNER, NATIONAL SCIENCE FOUNDATION (NSF), HITS | WWW.HITS.ORG

PORTRAIT

NO 1-11 | 2010

Heidelberg Institute for  
Theoretical Studies



THE  
CHARTS

## From the molecule to the universe – research with the computer



The Heidelberg Institute for Theoretical Studies (HITS) was officially opened with a colloquium on March 8th 2010. The HITS developed from the former EML Research by a name change. It remains with fundamental research of processing and structuring huge amounts of data, but on a bigger scale. Thereby the computer is still the laboratory. "HITS will be a multi-disciplinary institute", Klaus Tschira said at the opening. The research groups work on topics like molecular biology, astrophysics, and computational linguistics.

### HITS is Partner of CoSyne

The NLP group became partner of the recent EU project CoSyne. 7 partners from 5 countries will work on the automatization of the dynamic multi-lingual synchronization process of Wikis. German participants are 'Deutsche Welle' and the HITS. The project is funded with 2, 35 million Euros by the European Union.

### New HITS groups

Theoretical Astrophysics (TAP) started in April 2010, with group leader Prof. Volker Springel. In October, the Scientific Computing group established, led by Dr. Alexandros Stamatakis.



"Computational Thinking will be used as an essential skill by everyone in the world!"

Prof. Jeannette Wing, National Science Foundation / Carnegie Mellon University, 08.03.2010  
(Image: NSF / CMU)

## HITS

### Modeling-clay-proteins and shoebox-computer



The kindergarten "Pustelblume" from Heidelberg visited the HITS in the scope of the project "professional world of our parents". Dr Stefan Richter (MCM) used modeling clay and shoe boxes to explain the computer simulation of molecular protein connections to his daughter Julia and her 4 to 6 years old kindergarten friends. At the end of the day, the kids were enthusiastic over biochemistry, because "you may play with modeling-clay the whole day long."

**Dr Rebecca Wade**, MCM group leader, has been appointed member of the HBIGS (Hartmut Hoffmann-Berling International Graduate School of Molecular and Cellular Biology) faculty at Heidelberg University.

**Dr Carsten Baldauf**, Post-Doc in the MBM group led by Dr Frauke Gräter has received two awards for his research on the VWF-protein. He is the only non medical and theoretical researcher who received the "Young Investigator Prize of the German Society for Thrombosis and Hemostasis" in 2010. Moreover, Carsten received one of the Pier M. Mannucci Young Investigator prizes for the best articles of young researchers.

**Dr Michael Strube**, NLP group leader, and former NLP group member Dr Simone Ponzetto (now Heidelberg University) have been awarded for their Journal of Artificial Intelligence Research (JAIR) paper on Wikipedia as runner up for the Annual IJCAI-JAIR Best Paper Prize 2010.

**Dr Outi Salo-Ahen**, since 2006 in the MCM group, has returned to her home country Finland as a researcher in the Structural Bioinformatics Laboratory, Åbo Akademi University, Turku.

**Dr Matthias Stein**, PostDoc in Rebecca Wade's MCM group since 2005, has gone to Magdeburg, Germany, as group leader at the MPI for Dynamics of Complex Technical Systems. Congratulations and all the best!

## HITSTERS

### Shear forces involved in haemostasis

#### MBM Group finds the molecular mechanism for the development of blood diseases



One of the largest proteins found in the blood is called von Willebrand factor (vWF). It is activated when a blood vessel is injured, docking to the wound and closing it eventually. Under normal circumstances, vWF is cleaved before the process leads to thrombosis. However, it was previously not known how this regulatory mechanism worked. Using computer simulations, **Frauke Gräter** and her group have for the first time ever made it possible to determine the distribution of the mechanical forces acting on the protein in the nanometer scale. Shear forces occur in the bloodstream and exert a tension on the vWF protein located on the vessel wall. This leads the protein to partially unfold and expose a so-called active domain that specifically "cuts" vWF. "The von Willebrand factor is a kind of force sensor that is activated through high shear forces", explains Frauke Gräter. This research might contribute to increasing our understanding of the development of diseases such as thromboses or genetic bleeding disorders. The findings have been published in the Journal of Thrombosis and Haemostasis. More on [www.h-its.org](http://www.h-its.org)

#### SSDBM Conference: Intelligent Locks Against the Data Deluge



The 22nd International Conference on Scientific and Statistical Database Management took place with 80 participants from all around the world from 30th June to 2nd July 2010. The conference was realized jointly by Heidelberg University (Prof Michael Gertz) and the HITS. Prof Andreas Reuter acted as conference chair, Dr Wolfgang Müller (SDBV group) acted as the local organizational chair. The conference took place against the backdrop of maintaining and structuring of the continuously growing amount of scientific data.

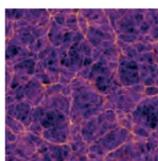
## RESEARCH

### Volker Springel: "We want to bring the Dark Matter to light."



**Volker Springel** deals with a topic that can not be examined experimentally: the evolution of the universe since the Big Bang. Therefore, the astrophysicist generates artificial universes with computer simulations to observe the evolution of galaxies and stars. His "lab" is located in the HITS. In March 2010 Volker Springel established the new research group "Theoretical Astrophysics". The position is linked with a professorship for astrophysics at the University of Heidelberg; his official residence is the HITS.

#### The Universe in a Computer



Springel studied physics in Tübingen and Berkeley and did his PhD at the LMU Munich and the MPA in 2000. After a Post Doc position at Harvard he returned to the MPA, leading since 2005 a research group for numerical cosmology.

His research focuses on the formation of galaxies and black holes as well as on numerical cosmology. Using simulations that process huge amounts of data, he deals especially with the mystery of the Dark Matter. "Using our simulations we aim to bring the Dark Matter to light," explains Volker Springel. A first step towards his aim was the so called "Millennium Simulation": He constructed an artificial universe to calculate how the universe develops after the Big Bang if it indeed mainly consists of Dark Matter. The result was stunning: the observed distribution of the visible matter corresponded quite well with the prediction of the simulation.

This year, Volker started the "Millennium XXL" simulation. It is able to calculate 300 billions of particles in total, 30 times as much as in the Millennium Simulation. Read more about it in the next HITS "Charts".

IMPRINT | DR. PETER SAUERESSIG (VISDP), SAUERESSIG@H-ITS.ORG, TEL. +49 - 6221- 533 245  
FOTOS: BERNHARDT UND PARTNER, NATIONAL SCIENCE FOUNDATION (NSF), HITS | WWW.H-ITS.ORG

## PORTRAIT

NR. 1-11 | 2010

Heidelberger Institut für  
Theoretische Studien



THE  
CHARTS