

Open Day at HITS



On June 8, the Open Day at HITS took place for the second time. The guests enjoyed the beautiful spring weather and a varied program consisting of lectures, tours, interactive offerings and presentations of the research areas. With the help of simulations and movies, the "HITSters" vividly described what computer-aided research can accomplish. The children's program included a colorful molecular experiment as well as soap bubbles that were helpful in solving mathematical problems. **Prof. Volker Springel** (TAP) gave two lectures on supercomputers and astronomy, one of which was especially for children and teenagers. To top off the event, the guests could join tours of the HITS building and the institute's computing facilities.

International Summer Science School @ HITS



For the first time, HITS participated in the Heidelberg International Summer Science School (ISH), a project for young people from Heidelberg's sister cities and partner organizations who are interested in natural sciences. For three weeks, **Daniel Waters** and **Jakub Nabaglia** from Australia have stayed at HITS and joined the MBM Group for an internship. **Davide Mercadante** supervised them during their stay.



"The doors were open and what I saw was impressive. But the scientists at the information stands were even more impressive: They were competent, easy to understand and friendly."

Jochen Tröger, senior professor, Heidelberg University

HITS

EMBO-Fellowship for Julia Romanowska



Dr. Julia Romanowska (MCM) has received a prestigious long-term fellowship from the European Molecular Biology Organization, EMBO, to carry out postdoctoral research in the MCM group at HITS. Julia recently completed her Ph.D. in Biophysics at Warsaw University. At HITS, she works on molecular simulation methodology to study how proteins behave in macro-molecularly crowded environments, such as the environment of biological cells. She also studies the mechanisms of how proteins interact with various inorganic surfaces, e.g. when a tooth implant contacts gum. Her simulations will help explain why some proteins are attracted to certain surfaces while others are not.

New Visiting Scientists

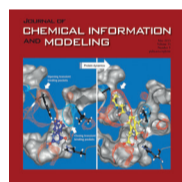
In June, HITS welcomed the following visiting scientists: **Dr. Samo Jordan** (Heidelberg University) started to work in the DMQ group and **Imogen Wright** (University of Western Cape, Cape Town, South Africa) in the CBI group. **Martin Sparre** (University of Copenhagen, Denmark) and **Dr. Dandan Xu** (Chinese Academy of Sciences, Beijing, China) joined the TAP group.

New Staff Members

In June, Maximilian Hoecker (seconded from Heidelberg University) began his work in the DMQ group. The doctoral scholars **Alexey Kozlov** and **Philipp Kämpfer** joined the SCO and CBI groups, respectively. In July, **Martin Pippel** joined the CBI group.

HITSTERS

TRAPP on the Frontpage



An article by HITS researcher **Dr. Daria Kokh** (MCM) has made it onto the front page of the Journal of Chemical Information and Modeling. TRAPP (A Tool for Analysis of **TR**ansient **B**inding **P**ockets in **P**roteins) is a new automated software platform for tracking, analysis, and visualization of binding pocket variations along a protein motion trajectory or within an ensemble of protein structures. These variations may encompass conformational changes ranging from local side chain fluctuations to global backbone motions. TRAPP performs accurate grid-based calculations of the shape and physicochemical characteristics of a binding pocket for each structure. It detects the conserved and transient regions of the pocket in an ensemble of protein conformations. The platform also provides tools for tracing the opening of a particular sub-pocket and residues that contribute to the binding site. TRAPP thus enables an assessment of the "druggability" of a disease-related target protein taking into account its flexibility. The project was conducted in cooperation with Merck-Serono, Darmstadt.

High Performance Computing in Leipzig

In mid-June, the 28th "International Supercomputing Conference" (ISC) was held in Leipzig. Drawing about 2,500 attendees from 47 nations plus 153 vendors and research organizations from the field of "High Performance Computing" (HPC), the ISC is one of the world's leading conferences and exhibitions in the area of HPC, networks and storage. HITS presented itself together with the University of Heidelberg. **Prof. Dr. Vincent Heuveline**, **Dr. Michael Schick** and **Maximilian Hoecker** (all DMQ) and their colleagues from the university showed presentations and 3D-videos of scientific work, and fostered the visibility of HITS in the area of "High Performance Computing".

IMPRINT | DR. PETER SAUERESSIG (VISOP), SAUERESSIG@HITS.ORG, TEL. +49 - 6221 - 533 245
PICTURES: HEIDELBERG UNIVERSITY, HITS | WWW.HITS.ORG

RESEARCH

HITS bemoans the death of Dr. Isabel Rojas



On July 9, 2013, our former colleague Dr. Isabel Rojas died after long illness.

Isabel has been a member of the precursor institutions of HITS almost from the first moment on. She established the SDBV research group and defined a scientific agenda that is valid to this very day. At the core of it is the SABIO-RK system, which she initially described as follows: "In the long run we want to make SABIO-RK the [freely accessible] encyclopaedia of reaction kinetics."

A group such as SDBV, the goal of which is to develop database support for scientific applications, has to operate in a highly interdisciplinary manner – and has to be composed accordingly. Having recognized this necessity and having implemented and practiced it in an exemplary manner is Isabel's outstanding achievement. In her person she ideally combined the necessary technical and people-oriented skills for such a task. As a result, the SDBV group is held in high regard by partners nationally and internationally.

In recognition of this achievement and her numerous other contributions she was awarded the distinction of a Fellow of the institute in 2009.

Isabel leaves her husband, Thomas Zurek, and two children, Patrick and Cecilia.

We will always gratefully remember the time we could spend with her.

OBITUARY

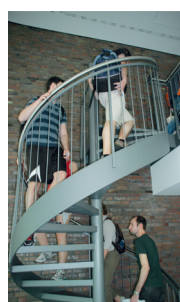
NR. 12 | 09-2013

Heidelberger Institut für
Theoretische Studien



THE
CHARTS

Tag der offenen Tür am HITS



Am 8. Juni lud das HITS zum zweiten Mal zum Tag der offenen Tür. Bei herrlichem Frühlingswetter erwartete die zahlreichen Besucher ein vielfältiges Programm aus Vorträgen, Führungen, Mitmachangeboten und Präsentationen der Forschungsgebiete. Die „HITS-Köpfe“ zeigten den Gästen mit Simulationen und Filmen anschaulich, was die Forschung mit dem Computer zu leisten vermag. Für Kinder gab es unter anderem ein buntes Molekularexperiment und Seifenblasen, mit denen man die Mathematikprobleme lösen konnte. **Prof. Volker Springel** (TAP) hielt zwei Vorträge zu Supercomputern und Astronomie, davon einen für Kinder und Jugendliche. Hausführungen und Führungen in den HITS-Server-Raum rundeten das Angebot ab.

International Summer Science School @ HITS



In diesem Jahr nahm das HITS zum ersten Mal an der Heidelberger International Summer Science School (ISH) teil. Das Projekt richtet sich an junge Menschen aus Heidelbergs Partnerstädten und Partnerorganisationen, die sich für Naturwissenschaften interessieren. Drei Wochen lang machten **Daniel Waters** und **Jakub Nabaglia** aus Australien ein Praktikum in der MBM-Gruppe. **Davide Mercadante** (MBM) betreute sie während ihres Aufenthalts am HITS.



„Die Türen waren offen, und das, was ich sah, beeindruckte. Noch beeindruckender waren die Wissenschaftler an den Infoständen: kompetent, verständlich und freundlich.“

Jochen Tröger, Seniorprofessor, Universität Heidelberg

HITS

EMBO-Stipendium für Julia Romanowska



Dr. Julia Romanowska (MCM) hat ein angesehenes Langzeitstipendium der European Molecular Biology Organization (EMBO) erhalten, um als Postdoc in der MCM-Gruppe zu forschen. Julia schloss kürzlich ihre Promotion in Biophysik an der Universität Warschau ab. Am HITS arbeitet sie an molekularer Simulationsmethodik. Sie erforscht, wie sich Proteine in makromolekular dichten Umgebungen verhalten, wie etwa in biologischen Zellen. Sie untersucht außerdem, wie Proteine mit verschiedenen anorganischen Oberflächen umgehen - zum Beispiel, wenn ein Zahnimplantat in Kontakt mit dem Zahnfleisch kommt. Ihre Simulationen sollen helfen zu erklären, wieso einige Proteine zu bestimmten Oberflächen hingezogen werden und andere nicht.

Neue Gastwissenschaftler

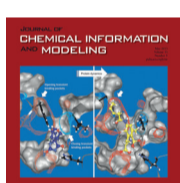
Im Juni 2013 kamen folgende Gastwissenschaftler ans HITS: **Dr. Samo Jordan** (Universität Heidelberg) in die DMQ-Gruppe und **Imogen Wright** (University of Western Cape, Cape Town, South Africa) in die CBI-Gruppe. **Martin Sparre** (University of Copenhagen, Denmark) und **Dr. Dandan Xu** (Chinese Academy of Sciences, Beijing, China) verstärkten die TAP-Gruppe.

Neue Mitarbeiter

Seit Juni 2013 arbeitet **Maximilian Hoecker** (abgeordnet von der Universität Heidelberg) in der DMQ-Gruppe. **Alexey Kozlov** verstärkt die SCO-Gruppe als Promotionsstipendiat. Ebenfalls als Promotionsstipendiat kam **Philipp Kämpfer** in die CBI-Gruppe. Im Juli nahm **Martin Pippel** als wissenschaftlicher Mitarbeiter seine Arbeit in der CBI-Gruppe auf.

HITSKÖPFE

„TRAPP“ auf der Titelseite



Ein Artikel der HITS-Forscherin **Dr. Daria Kokh** (MCM) schaffte es auf die Titelseite des Journal of Chemical Information and Modeling. TRAPP (A Tool for Analysis of **TR**ansient Binding **P**ockets in **P**roteins) ist eine neue automatische Software-Plattform zum Auffinden, zur Analyse und Visualisierung von Bindungstaschen. Dabei wird die Veränderung einer Bindungstasche im Verlauf einer Proteinsimulation oder innerhalb eines Ensembles von Proteinstrukturen untersucht. Zu diesen Strukturänderungen zählen Änderungen in der Anordnung der Seitenketten und umfassende Bewegungen der Proteinkette. TRAPP führt mit Hilfe einer räumlichen Gitterstruktur genaue Berechnungen der Form und physikochemischen Merkmale einer Bindungstasche für alle räumlichen Anordnungen eines Proteins durch. Die Plattform erkennt die konservierten und variablen Bereiche einer Tasche in einem Ensemble räumlicher Anordnungen. TRAPP stellt auch Werkzeuge bereit, um die Öffnung einer bestimmten Untertasche festzustellen sowie Aminosäurereste zu identifizieren, die zu einer Bindungsstelle beitragen. Dadurch ermöglicht es TRAPP, die Flexibilität einer Bindungstasche in die Bewertung einzubeziehen, ob ein krankheitsbezogenes Zielprotein als Bindestelle für Arzneistoffe geeignet ist. Das Projekt wurde in Zusammenarbeit mit Merck-Serono, Darmstadt, durchgeführt.

High Performance Computing in Leipzig

Mitte Juni fand in Leipzig die 28. „International Supercomputing Conference“ (ISC) statt. Mit rund 2500 Besuchern, 47 vertretenen Nationen, 153 Anbietern und Forschungseinrichtungen aus dem Bereich „High-Performance Computing“ (HPC) gilt die ISC als eine der führenden weltweiten Konferenzen und Ausstellungen für den Bereich HPC, Netzwerke und Speicher. Das HITS präsentierte sich dort gemeinsam mit der Universität Heidelberg. **Prof. Dr. Vincent Heuveline**, **Dr. Michael Schick** und **Maximilian Hoecker** (alle DMQ) zeigten zusammen mit den Uni-Kollegen Präsentationen und 3D-Videos wissenschaftlicher Arbeiten und sorgten für Sichtbarkeit des HITS im Bereich „High Performance Computing.“

IMPRESSUM | DR. PETER SAUERESSIG (VISDP), SAUERESSIG@H-ITS.ORG, TEL. +49 - 6221 - 533 245
FOTOS: UNIVERSITÄT HEIDELBERG, HITS | WWW.H-ITS.ORG

FORSCHUNG

Das HITS trauert um Dr. Isabel Rojas



Am 9. Juli 2013 verstarb unsere ehemalige Mitarbeiterin Dr. Isabel Rojas nach langer, schwerer Krankheit.

Isabel hat den Vorläuferorganisationen des HITS fast von der ersten Minute an angehört. Sie hat die Forschungsgruppe SDBV aufgebaut und ihr eine wissenschaftliche Agenda gegeben, die bis heute verbindlich ist. Deren Kern ist das System SABIO-RK, das sie selbst so beschrieb: „Unser Ziel ist es, SABIO-RK zu einer [frei zugänglichen] Enzyklopädie der Reaktionskinetik zu entwickeln.“

Eine Gruppe wie SDBV, deren Aufgabe die Entwicklung von Datenbank-Lösungen für wissenschaftliche Anwendungen ist, muss notwendigerweise interdisziplinär arbeiten und entsprechend aufgebaut sein. Dies erkannt, umgesetzt und konsequent gelebt zu haben ist Isabels herausragendes Verdienst. Sie hat die für eine solche Aufgabe erforderlichen fachlichen und menschlichen Führungsqualitäten in idealer Weise verbunden. Das Ergebnis ist eine Forschungsgruppe, die national und international höchste Anerkennung genießt.

Im Jahr 2009 wurde sie für diese Leistung und für ihre zahlreichen anderen Beiträge zum Aufbau des Instituts zum Fellow ernannt.

Isabel hinterlässt ihren Mann, Thomas Zurek, und zwei Kinder, Patrick und Cecilia.

Wir werden immer dankbar an die Zeit mit ihr zurückdenken.

NACHRUF

NO 12 | 09-2013

THE
CHARTS

Heidelberg Institute for
Theoretical Studies

