

HITS on board – digital research on the science boat MS Wissenschaft



The floating science center "MS Wissenschaft" will be cruising Germany's rivers again this year. The boat features a fascinating exhibition on the occasion of the Year of Science "Digital Society." In August, the boat will lie at anchor at the Mannheim banks of the Rhine, and on Wednesday, 6 August 2014 at 19:00 h, HITS will offer an entertaining evening program there, with presentations, interactive exhibits and more. Under the motto "Digital research – from molecules to the universe", HITSters will explore opportunities of computer-aided, data-driven research methods. The highlight of the event will be a panel discussion with **Theresia Bauer**, Minister of Science of the federal state of Baden-Wuerttemberg, **Volker Stollorz**, freelance science journalist from Cologne, and others. The group will discuss various aspects of "digital research" and its dissemination. Admission is free, refreshments will be provided.

Galaxies out of a supercomputer

More than 8,000 processors were needed for the new simulation "Illustris" on the physics of galaxy formation. HITster **Volker Springel** contributed to the project that was published in "Nature". See more in "Special".

Save the date:

9 - 13 July, 2014: HITS @ Explore Science, Mannheim, Luisenpark. Motto: "Biodiversity".

HITS

Dazzler Blog online



The **Dazzler Blog** is about algorithms and software for DNA sequence assembly, specifically for next, next gen long-read sequencers such as the Pacbio RS II sequencer.

The team consist of **Prof. Eugene "Gene" Myers**, a director at the Max-Planck Institute for Molecular Cell Biology and Genetics (MPI-CBG), **Dr. Siegfried Schloissnig**, junior group leader at the Heidelberg Institute for Theoretical Studies (HITS), and his postdoc, **Martin Pippel**, and two Ph.D. students **Philipp Kämpfer** and **Philipp Bongartz**.

See more here: <http://dazzlerblog.wordpress.com>

New Visiting Scientists

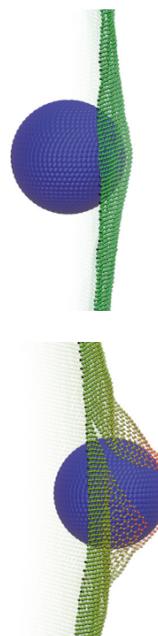
Prof. Renate Griffith from School of Medical Sciences (University of New South Wales) is spending her sabbatical at HITS from April to July 2014 as a member of the MCM group. In June, **Dr. Jaime Forero-Romero** (Universidad de los Andes, Bogotá/Colombia) joined the TAP group, and **Dr. Stefanie Speidel** (KIT Karlsruhe) started working in the DMQ group.

New Staff Members

In April, **Dr. Nils Wötzel** joined the ITS group as Software Developer, and **Philipp Gerstner** from the University of Heidelberg joined the DMQ group as PreDoc. In June, **Ana Herrera Rodríguez** came to the MBM group as doctoral student.

HITSTERS

Graphene mechanics: High Stress under the Tip



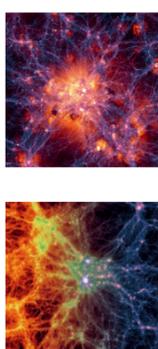
Graphene is a material which is only one-atom layer thick. Yet, it is mechanically so robust that thin tips of most materials will break upon pushing into graphene, with diamond being one of the few exceptions. MBM group leader **Frauke Gräter** now published two papers on the topic of graphene mechanics, together with former MBM group members **Ilona Baldus** and **Bogdan Costescu**. The scientists asked how a single-atom graphene layer can be so strong. To this end, Gräter and Costescu modeled an atomic force microscopy round tip which presses on a circular graphene sheet. In order to simulate graphene sheets and tips close to the sizes used in the experiments – huge systems to handle on the computer, they developed a computationally efficient potential. Its outstanding feature is a realistic rupture of the carbon molecule bonds.

In computer simulations of a typical indentation experiment, they determined the atomic stress distribution on a graphene sheet during the indentation process. As a deviation from the theory, they found that the atomic stress concentrates under the tip more strongly than predicted and causes a high probability of bond breaking only in this area. In turn, stress levels decrease rapidly towards the edge of the sheet. The study suggests the analysis of dynamic stresses within strongly deformed materials as a valuable tool to predict and interpret the response of stressed materials beyond graphene. Their study has been published in two back-to-back papers in the journal *Physical Chemistry Chemical Physics*, 05/2014.

Graphene is comprised of pure carbon in the form of a very thin, nearly transparent sheet. It is remarkably strong for its low weight. Beyond that, it can conduct heat and electricity with great efficiency. Created in 2004 for the first time, Graphene is not yet used in commercial applications, but scientists plan on using it in fields such as biological engineering, filtration, photovoltaic or energy storage.

RESEARCH

In "Nature": Galaxies out of a Supercomputer



Galaxies are typically comprised of several hundred billion stars and display a variety of shapes and sizes. The formation of galaxies is one of the most involved and complex problems of astrophysics. In cooperation with an international team of scientists at the MIT, Harvard University and other institutions, HITS scientist **Prof. Volker Springel (TAP)** has now succeeded in simulating the physics of galaxy formation in a vast region of space with very high accuracy. In the journal *Nature*, they report that the calculation yielded, for the first time, a realistic mix of elliptical and spiral galaxies. Moreover, the simulation can explain the enrichment of heavy elements (so-called "metals") in neutral hydrogen gas. In addition, the calculated galaxies are distributed in space as observed with telescopes. The "Illustris" simulation project produced more than 200 terabytes of data and required the combined power of more than 8,000 processors for several months. The simulation was possible thanks to the AREPO code for cosmological structure formation, which was developed at HITS, and the supercomputers CURIE in France and SuperMUC in Germany. Dr. Mark Vogelsberger from MIT is the first author of the study ("Properties of galaxies reproduced by a hydrodynamic simulation", *Nature*, May 8, 2014, doi:10.1038/nature13316). Previous simulations were not able to create elliptical and spiral galaxies and follow the small-scale evolution of interstellar gas and stars, which are closely linked to each other. With the "Illustris" project, the cosmologists have now taken a major step towards addressing this issue. "The results mark a radical change in theoretical studies of galaxy formation," says Volker Springel. "We can finally leave the old and coarse models of galaxy formation behind and precisely calculate dark matter and more."

The memory consumption of the Illustris simulation was more than 25 terabytes, and the generated data volume of over 200 terabytes sets a new record in cosmology. This flood of data makes it possible to study the evolution of about 50,000 well-resolved galaxies in detail, and to make theoretical predictions for cosmological structure formation with high accuracy.

More information: www.illustris-project.org

IMPRINT | DR. PETER SAUERESSIG (VISEDPI), SAUERESSIG@HITS.ORG, TEL. +49 - 6221 - 533 245 PHOTOS: HITS, ILLUSTRIS PROJECT, T. GABRIEL | WWW.HITS.ORG

SPECIAL

NR. 15 | 06-2014

Heidelberger Institut für
Theoretische Studien



THE
CHARTS

HITS an Bord – Forschung digital auf der MS Wissenschaft



Auch in diesem Jahr befährt die „MS Wissenschaft“ als schwimmendes Science Center die Flüsse der Republik und präsentiert im Rahmen des Wissenschaftsjahres „die digitale Gesellschaft“ eine sehenswerte Ausstellung. Im August liegt das Schiff am Mannheimer Rheinufer vor Anker. Dort bietet das HITS am Mittwoch, 6. August 2014, ab 19:00 ein abwechslungsreiches Abendprogramm, mit Vorfürhungen, Mitmachstationen und weiteren Angeboten. Unter dem Motto: „Forschung digital – vom Molekül bis zum Universum“ beleuchten die HITS-Köpfe die Möglichkeiten computergestützter, datengetriebener Methoden in der Forschung. Im Zentrum der Veranstaltung steht eine Podiumsdiskussion. Teilnehmer sind unter anderem **Theresia Bauer**, Wissenschaftsministerin des Landes Baden-Württemberg, und **Volker Stollorz**, freier Wissenschaftsjournalist aus Köln. Die Runde erörtert verschiedene Aspekte der „digitalen Forschung“ und ihrer Vermittlung in die Öffentlichkeit. Der Eintritt ist frei, für Erfrischungen ist gesorgt.

The Charts „Spezial“: Galaxien aus dem Großrechner

8000 Prozessoren arbeiteten an der neuen Computersimulation „Illustris“ zur Galaxienentstehung. Die Publikation, an der **Volker Springel** (TAP) beteiligt war, erschien im Fachmagazin „Nature“. Mehr dazu in „Spezial“.

Termine zum Vormerken:

9.-13. Juli 2014: HITS@ Explore Science, Mannheim, Luisenpark: Mitmachstationen unter dem Motto „Biologische Vielfalt gibt es überall“

HITS

Dazzler Blog ist online



Ein neuer Blog beschäftigt sich mit Algorithmen und Software für die Assemblierung von Genomsequenzen. „**Dazzler Blog**“ befasst sich vor allem mit Next-Generation-Sequenzierern mit langen Lese-längen wie den Pacbio RS II Sequenzierer.

Teammitglieder und potenzielle Autoren von Blogbeiträgen sind: **Prof. Eugene „Gene“ Myers**, einer der Direktoren am Max-Planck-Institut für molekulare Zellbiologie und Genetik und Mentor der CBI-Juniorgruppe am HITS; außerdem CBI-Gruppenleiter **Dr. Siegfried Schloissnig** sowie dessen PostDoc **Martin Pippel** und die Doktoranden **Philipp Kämpfer** und **Philipp Bongartz**.

Weitere Informationen: <http://dazzlerblog.wordpress.com>

Neue Gastwissenschaftler

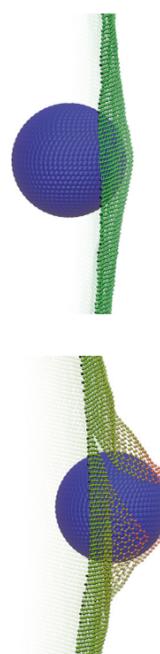
Prof. Renate Griffith von der Medizinischen Fakultät der Universität New South Wales verbringt von April bis Juli 2014 als Mitglied der MCM-Gruppe ihr Sabbatical am HITS. Im Juni kam **Dr. Jaime Forero-Romero** (Universidad de los Andes, Bogotá/Kolumbien) in die TAP-Gruppe und **Dr. Stefanie Speidel** (KIT Karlsruhe) in die DMQ-Gruppe.

Neue Mitarbeiter

Seit April arbeitet **Dr. Nils Wötzel** als Softwareentwickler in der ITS-Gruppe. **Philipp Gerstner** kam von der Universität Heidelberg als PreDoc in die DMQ-Gruppe. Im Juni kam **Ana Herrera Rodríguez** als Doktorandin in die MBM-Gruppe.

HITSKÖPFE

Graphenmechanik: Hochspannung unter der Spitze



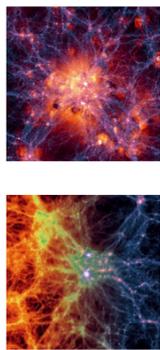
Graphen besteht aus einer einzigen Atomlage. Dennoch ist es mechanisch so widerstandsfest, dass dünne Spitzen der meisten Materialien brechen würden, wenn sie auf Graphen drücken würden. **Frauke Gräter**, Leiterin der MBM-Gruppe, hat gemeinsam mit den ehemaligen Gruppenmitgliedern **Ilona Baldus** und **Bogdan Costescu** zwei Arbeiten zum Thema Graphenmechanik veröffentlicht. Die Wissenschaftler gingen der Frage nach, warum das aus einer einzigen Atomlage bestehende Graphen so robust ist. Zu diesem Zweck modellierten Gräter und Costescu eine abgerundete Spitze, die auf eine kreisförmige Graphenschicht drückt, ganz ähnlich wie in entsprechenden Rasterkraftmikroskopie-Experimenten. Graphenschicht und Spitze sollten mit der in dem Experiment verwendeten Größe simuliert werden. Um die dadurch anfallende Rechenaufwand per Computer bewältigen zu können, entwickelten die Wissenschaftler ein rechnerisch effizientes Potenzial. Dessen herausragendes Merkmal ist ein realistischer Bruch der Kohlenstoff-Molekülbindungen in Graphen.

Mit einer Computersimulation eines typischen Abdruckexperiments konnten die Forscher die atomare Spannungsverteilung während des Abdruckprozesses auf eine Graphenschicht bestimmen. Sie fanden abweichend von der Theorie heraus, dass die atomare Spannung sich unterhalb der Spitze stärker als bisher angenommen konzentriert und mit einer hohen Wahrscheinlichkeit zum Bruch der Bindungen in diesem Bereich führt. Das Spannungsniveau sinkt zum Ende der Schicht hin stark ab. Die Studie kommt zu dem Schluss, dass die Analyse dynamischer Belastung in stark verformbaren Materialien ein wertvolles Instrument ist, um Vorhersagen über andere beanspruchte Materialien machen und deren Reaktion interpretieren zu können. Die Studie wurde in zwei Arbeiten im Fachmagazin Physical Chemistry Chemical Physics, 05/2014 veröffentlicht.

Graphen besteht aus reinem Kohlenstoff in Form einer sehr dünnen, fast durchsichtigen Schicht. Im Hinblick auf sein geringes Gewicht ist es bemerkenswert robust. Darüber hinaus kann es höchst effizient Wärme und Strom leiten. Graphen wurde 2004 erstmalig hergestellt. Es wird noch nicht kommerziell eingesetzt, Wissenschaftler wollen aber das Material in Bereichen wie Bio-Engineering, Filtertechnologie, Photovoltaik und Energiespeicherung nutzen.

FORSCHUNG

In „Nature“: Galaxien aus dem Großrechner



Galaxien enthalten einige hundert Milliarden Sterne und zeigen vielfältige Formen und Größen. Ihre Entstehungsgeschichte ist eines der größten und komplexesten Probleme in der Astrophysik. HITS-Wissenschaftler **Prof. Volker Springel** (TAP) ist es zusammen mit einem internationalem Team von Forschern am MIT, der Harvard University und anderen Einrichtungen gelungen, die Physik der Galaxienentstehung in einem riesigen Raumbereich mit sehr hoher Genauigkeit zu simulieren. Im Fachjournal Nature berichten sie, dass dabei erstmals ein realistischer Mix aus elliptischen Galaxien und Spiralgalaxien entstand. Die Simulation kann auch erklären, wie sich schwere Elemente (sogenannte „Metalle“) in neutralem Wasserstoffgas anreichern. Zudem sind die berechneten Galaxien im Raum so verteilt, wie es mit Teleskopen beobachtet wird. Die Datenmenge des „Illustris“ genannten Projekts umfasst mehr als 200 Terabyte und erforderte die Rechenkraft von mehr als 8000 Prozessoren für mehrere Monate. Möglich wurde die Simulation durch den am HITS entwickelten AREPO-Code für kosmische Strukturentstehung und die Supercomputer CURIE in Frankreich und SuperMUC in Deutschland. Erstautor der Studie war Dr. Mark Vogelsberger vom MIT („Properties of galaxies reproduced by a hydrodynamic simulation“, Nature, May 8th, 2014, doi:10.1038/nature13316).

Bisherige Simulationen des Kosmos konnten keine elliptischen und Spiralgalaxien schaffen und die eng verzahnte Entwicklung von interstellarem Gas und den Sternen auf kleinen Skalen nachvollziehen. Mit „Illustris“ sind die Kosmologen nun ein großes Stück weiter gekommen. „Die Ergebnisse markieren einen Umbruch in der Forschung zur Galaxienentstehung“, so Volker Springel. „Endlich können wir die alten groben Modelle hinter uns lassen und nicht nur die Dunkle Materie präzise berechnen.“

Der Speicherbedarf der Illustris-Simulation von mehr als 25 Terabyte und das erzeugte Datenvolumen von mehr als 200 Terabyte setzen neue Rekordmarken. Diese Datenflut erlaubt es, die Entstehungsgeschichte von etwa 50.000 gut aufgelösten Galaxien im Detail zu studieren und theoretische Voraussagen für kosmische Strukturentstehung mit hoher Genauigkeit zu machen.

Mehr Informationen: www.illustris-project.org

IMPRESSUM | DR. PETER SAUERESSIG (VISDP), SAUERESSIG@HITS.ORG, TEL. +49 - 6221 - 533 245
FOTOS UND BILDER: HITS, ILLUSTRIS PROJECT, T. GABRIEL | WWW.HITS.ORG

SPEZIAL

NO 15 | 06-2014

THE
CHARTS

Heidelberg Institute for
Theoretical Studies



HITS