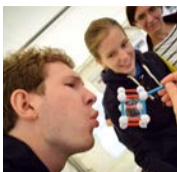


HITS



Statistics, spider silk, supernovae: HITS open house event

On July 2nd, HITS opened its doors to the public for the open house event 2016. The visitors could learn about the research conducted at HITS and had the chance to get a glimpse behind the scenes. In three talks, **Volker Springel** (Theoretical Astrophysics), **Christoph Pfrommer** (High-Energy Astrophysics and Cosmology) and **Christopher Zapp** (Molecular Biomechanics) provided insights into their exciting computational research on topics ranging from molecules to the universe. **Lucas Czech** (Scientific Computing) presented a science slam on computing phylogenetic trees of organisms in tropical rainforest soil.



Moreover, the HITS groups presented their research and offered various hands-on stations for kids: from a virtual journey through the universe via Oculus rift virtual headsets, the game "Gravity Pong" and geometric soap-bubbles to protein origami and spectral colors. There were also hourly guided tours through the HITS building.

HEIDELBERG
LAUREATE
FORUM

4th Heidelberg Laureate Forum (HLF): September 18-23, 2016

Visit of the "Young Researchers" at HITS: September 21, 2016

HITS

Excellent: Awards and memberships



In recognition of his scientific contributions, **Prof. Volker Springel**, leader of the TAP group, has been elected to the German Academy of Sciences Leopoldina. Founded in 1652, the Leopoldina is one of the oldest academies of science in the world. With some 1,500 members, the Leopoldina brings together outstanding scientists from Germany, Austria, Switzerland and many other countries. MCM group leader and Scientific Director **Prof. Rebecca Wade** was awarded the International Society of Quantum Biology and Pharmacology (ISQBP) Award in Computational Biology. The ISQBP Award in Computational Biology is given biannually at the President's Meeting to a researcher that has performed high-quality research in a field of interest to the ISQBP and has served the society or the interests of the society. The masters-level course „Hands-on Bioinformatics Practical“ by **Prof. Alexandros Stamatakis** and **Dr. Tomas Flouri** from the SCO group won the award for the best practical of the computer science department at the Karlsruhe Institute of Technology (KIT). The aim of the internship was to provide a useful new optimized open source code for alignments for biologists.



New staff members and visiting scientists

In June, **Dr. Steffen Brinkmann** joined the SDBV group, while DAAD Wise scholar **S. Balaji Venkat** (Indian Institute of Science, Bangalore) joined the HAC group. In mid-June, **Leo Born** started writing his Bachelor thesis in the NLP group. At the end of June, the MBM group welcomed visiting scientist **Arjun Ray** from the CSIR-Institute of Genomics and Integrative Biology in New Delhi and in early July **Florian Franz** joined the group as a Master student. Since the end of June, **Prof. Olivier Guichard** (Université de Strasbourg, France) has been a visiting scientist in the GRG group, while **Fabian Kißler** joined the DMQ group in early July as a PhD-student. Since mid-July, **Khoulood Madhbouh** (Tunis El Manar University, Tunisia) is a visiting scientist to the SCO group, while the TAP group welcomed visiting scientist **Conrad Chan** from the Australian Monash Centre for Astrophysics.

HITS groups: Astrominformatics (AIN), Computational Biology (CBI), Computational Statistics (CST), Data Mining and Uncertainty Quantification (DMQ), Groups and Geometry (GRG), High-Energy Astrophysics and Cosmology (HAC), Molecular Biomechanics (MBM), Molecular and Cellular Modeling (MCM), Natural Language Processing (NLP), Physics of Stellar Objects (PSO), Scientific Computing (SCO), Scientific Databases and Visualization (SDBV), Theoretical Astrophysics (TAP)

HITSTERS

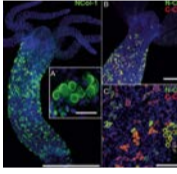
Efficient scaling on "JUQUEEN"



Prof. Friedrich Röpke and **Dr. Philipp Edelmann** (both Physics of Stellar Objects) presented the group's SLH Code (Seven-League Hydro code) during the Extreme scaling workshop 2016 at the Jülich Supercomputing Center. The code is able to scale very efficiently on the JUQUEEN supercomputer. The HITS astrophysicists have been able to achieve 90% efficiency when increasing the number of processors from a quarter of the machine (114,688 cores) to the full machine (458,752). This achievement has been awarded with a membership of the SLH code in the High-Q Club, which is a selection of scientific high-performance codes that are able to use the full JUQUEEN supercomputer efficiently.



Made by Nature: a highly elastic pressurized balloon



Collagens constitute the dominant class of extracellular proteins in multicellular organisms. They are highly abundant wherever a high elasticity is needed. The collagens of cnidarians, such as jellyfish and sea anemones, are particularly fascinating. They structure the wall of the nematocyst, a balloon-shaped organelle, designed to naturally withstand high pressure. Until now it was not known how collagens contribute to define the properties of such a highly elastic pressurized balloon.

By employing a dual experimental and computational approach, HITS researchers **Prof. Frauke Gräter** and **Dr. Davide Mercadante** from the Molecular Biomechanics group and researchers from the group of Dr. Suat Özbek at the Centre for Organismal Studies at Heidelberg University discovered how the short collagen fragments of cnidarians assemble in a very peculiar way into highly functional and mechanically strong networks that constitute the organelle's wall. The trick is to use two different types of 'sticky' domains at the two ends of the mini-collagen protein. The many cysteines in these terminal domains can establish crosslinks between molecules, just like in the rubber used for tires. These differences in the end domains are thought to be vital for building a strong and elastic nematocyst 'balloon'. The results of this project have been published in the April issue of Scientific Reports.

RESEARCH



Prof. Dr. Jeannette M. Wing, HITS Scientific Advisory Board

Jeannette M. Wing is Corporate Vice President of Microsoft Research in charge of its basic research laboratories worldwide. Prior to 2013, she was the President's Professor of Computer Science at Carnegie Mellon University, Pittsburgh, USA. She also served as Assistant Director for the Computer and Information Science and Engineering Directorate at the National Science Foundation (NSF) from 2007 to 2010. Jeannette Wing studied Electrical Engineering and Computer Science at MIT (B. Sc., M.Sc. 1979), where she also earned her Ph.D. in Computer Science (1983). Since then, she has led many research projects and has published widely. She has been a leading member of the formal methods community and also been a strong promoter of computational thinking. In March 2010, she held the keynote speech at the opening colloquium of HITS. Since 2014, Jeannette Wing has been a member of the HITS Scientific Advisory Board.



Prof. Dr. Alex Szalay, HITS Scientific Advisory Board

Alex Szalay is the Bloomberg Distinguished Professor at the Johns Hopkins University in Baltimore, USA, in the Departments of Physics and Astronomy and in the Department of Computer Science. He is also the director of the Institute for Data Intensive Engineering and Science. He authored many fundamental papers on the formation of structure in the Universe and on the nature of dark matter in the Universe. Born in Hungary, he received his Ph.D. in Astrophysics at the Eötvös Lorand University in Budapest in 1975. He spent postdoc years in Berkeley and at Fermilab and returned to Budapest in 1982 as assistant professor. In 1989, he joined the Johns Hopkins University. Alex Szalay is most widely known for his seminal role in assuring the success of the Sloan Digital Sky Survey. He was also part of the core team to build the "Galaxy Zoo". For his contributions, he has received numerous awards. Since 2014, he has been a member of the HITS Scientific Advisory Board.

IMPRINT | DR. PETER SAUERESSIG (VISDP), SAUERESSIG@HITS.ORG, TEL. +49 - 6221 - 533 245
PHOTOS: HITS, NSF/CMU, GÜLAY KESKIN, WOLFGANG MÜLLER | WWW.HITS.ORG

PORTRAIT

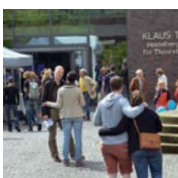
NR. 24 | 09-2016

Heidelberger Institut für
Theoretische Studien



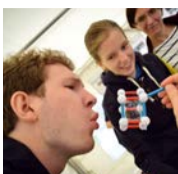
THE CHARTS

HITS



Statistik, Spinnenseide und Supernovae: Tag der offenen Tür

Am Samstag, 2. Juli 2016, fand der Tag der offenen Tür am HITS statt. Alle, die ein Forschungsinstitut einmal hautnah erleben wollten, hatten die Möglichkeit, das Institut zu besuchen und „hinter die Kulissen“ zu schauen. Die Besucher erwartete ein vielfältiges Programm: **Volker Springel** (Theoretical Astrophysics), **Christoph Pfrommer** (High-Energy Astrophysics and Cosmology) und **Christopher Zapp** (Molecular Biomechanics) hielten jeweils einen Vortrag und brachten den Besuchern ihre spannende Forschung näher. **Lucas Czech** (Scientific Computing) präsentierte einen Science Slam, einen populärwissenschaftlichen Vortrag, über die Stammbaumberechnung von Organismen in Tropenböden.



Neben den Vorträgen gab es außerdem Präsentationen der einzelnen HITS-Gruppen und ihrer Forschung sowie verschiedene Mitmachstationen für Kinder und Jugendliche: Von der virtuellen Reise durch das Universum mit der Oculus Rift-Brille, dem Spiel „Gravity Pong“ und geometrischen Seifenblasen bis hin zu Origami-Proteinen und Spektralfarben. Die stündlichen Hausführungen durch das HITS Gebäude rundeten das Programm ab.

HEIDELBERG
LAUREATE
FORUM

4. Heidelberg Laureate Forum (HLF): 18.-23. September 2016

Besuch der „Young Researchers“ am HITS: 21. September 2016

HITS

Ausgezeichnet!



Prof. Volker Springel, Leiter der TAP-Gruppe, ist in Anerkennung seiner wissenschaftlichen Leistungen zum Mitglied der Nationalen Akademie der Wissenschaften Leopoldina gewählt worden. Die Leopoldina ist eine der ältesten Wissenschaftsakademien der Welt. **Prof. Rebecca Wade**, Leiterin der MCM-Gruppe und Institutsprecherin des HITS, wurde mit dem Preis der „International Society of Quantum Biology and Pharmacology“ (ISQBP) für „Computational Biology“ ausgezeichnet. Der „ISQBP Award in Computational Biology“ wird alle zwei Jahre an Wissenschaftler verliehen, die hervorragende Forschungsleistungen in einem der Gebiete der ISQBP erbracht und sich für die Organisation oder ihre Interessen eingesetzt haben. Ebenfalls ausgezeichnet wurde die Lehrveranstaltung „Hands-on Bioinformatics Practical“ von **Prof. Alexandros Stamatakis** und **Dr. Tomas Flouri** (SCO) als bestes Praktikum des Fachbereichs Informatik am Karlsruher Institut für Technologie (KIT). Ziel des Praktikums war es, ein für die Biologie nützliches und von Biologen nutzbares neues Open-Source-Werkzeug zur Verfügung zu stellen.



Neue Mitarbeiter und Gastwissenschaftler

Seit Anfang Juni ist **Dr. Steffen Brinkmann** wissenschaftlicher Mitarbeiter in der SDBV-Gruppe, DAAD Wise Stipendiat **S. Balaji Venkat** (Indian Institute of Science, Bangalore) stieß ebenfalls Anfang Juni zur HAC-Gruppe. **Leo Born** schreibt seit Mitte Juni seine Bachelor-Arbeit in der NLP-Gruppe. Die MBM-Gruppe begrüßte Ende Juni Gastwissenschaftler **Arjun Ray** vom CSIR-Institute of Genomics and Integrative Biology in Neu Delhi und Anfang Juli Master-Student **Florian Franz**. **Prof. Dr. Olivier Guichard** (Université de Strasbourg) arbeitet seit Ende Juni als Gastwissenschaftler in der GRG-Gruppe, Doktorand **Fabian Kießler** stieß Anfang Juli zur DMQ-Gruppe, seit Mitte Juli ist **Khouloud Madhbouh** (El Manar University, Tunis) Gastwissenschaftlerin in der SCO-Gruppe. Ende Juli begrüßte die TAP-Gruppe **Conrad Chan** vom australischen Monash Centre for Astrophysics als Gastwissenschaftler.

HITS-Gruppen: Astroinformatics (AIN), Computational Biology (CBI), Computational Statistics (CST), Data Mining and Uncertainty Quantification (DMQ), Groups and Geometry (GRG), High-Energy Astrophysics and Cosmology (HAC), Molecular Biomechanics (MBM), Molecular and Cellular Modeling (MCM), Natural Language Processing (NLP), Physics of Stellar Objects (PSO), Scientific Computing (SCO), Scientific Databases and Visualization (SDBV), Theoretical Astrophysics (TAP)

HITSKÖPFE

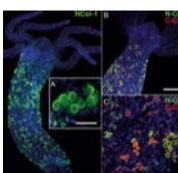
Effizient skaliert



Prof. Friedrich Röpke und **Dr. Philipp Edelmann** (beide Physics of Stellar Objects), präsentierten beim Extremskalierungs-Workshop 2016 am Jülich Supercomputing Center ihren Seven-League Hydro Code (SLH). Sie zeigten, dass der Code auf dem Supercomputer „JUQUEEN“ eine Effizienz von 90% erreicht, wenn die Anzahl der Prozessoren von einem Viertel der Maschine (114.688 Kerne) zur kompletten Maschine (458.752 Kerne) erhöht wurde. Diese Leistung wurde mit einer Mitgliedschaft des SLH-Codes im „High-Q Club“ des Forschungszentrums Jülich belohnt – für wissenschaftliche Codes mit hoher Leistung, die den gesamten Supercomputer effizient nutzen können.



Material aus der Natur: ein hochelastischer Druckballon



Kollagene bilden die dominierende Klasse extrazellulärer Proteine in mehrzelligen Organismen. Sie sind immer dort zahlreich vorhanden, wo eine hohe Elastizität benötigt wird. Die Kollagene von Nesseltieren - mehrzelligen Organismen, die zu den ältesten auf der Erde zählen, einschließlich Quallen und Seenanemonen - sind besonders faszinierend. Sie bauen die Wand der Nesselzelle auf, ein ballonförmiges Organell, das einem Druck von bis zu 150 Megapascal (ca. 1500 Bar) standhalten kann. Bisher war nicht bekannt, wie Kollagene es schaffen, einen solch hochelastischen Druckballon zu bilden.

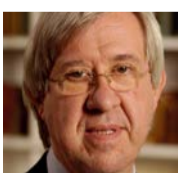
Anhand eines sowohl experimentellen als auch theoretischen Ansatzes entdeckten nun die HITS-Forscher **Prof. Frauke Gräter** und **Dr. Davide Mercadante** (beide Molecular Biomechanics) gemeinsam mit Forschern am Centre for Organismal Studies der Universität Heidelberg (Leitung: Dr. Suat Özbek), wie sich die kurzen Kollagenfragmente, die man auch Mini-Kollagene nennt, zu hochfunktionellen und mechanisch starken Netzwerken anordnen, die die Wand der Organelle bilden. Der Trick besteht darin, zwei unterschiedliche Arten von „klebrigen“ Bereichen an den beiden Enden des Mini-Kollagen-Proteins zu nutzen. Diese Enden enthalten besonders viele Cysteine, spezielle Bestandteile von Proteinen. Sie können dadurch die Kollagen-Moleküle vernetzen, ganz ähnlich wie das etwa im Kautschuk für die Herstellung von Reifen der Fall ist. Diese Unterschiede gelten als entscheidend für den Aufbau eines starken und elastischen Nesselkapsel-„Ballons“. Die Erkenntnisse können für die Entwicklung neuer Materialien nützlich sein; denn als solche können diese klebrigen Enden in jedes Molekül eingebaut werden. Die Forschungsergebnisse wurden in der April-Ausgabe von Scientific Reports veröffentlicht.

FORSCHUNG



Prof. Dr. Jeanette M. Wing, HITS Scientific Advisory Board

Jeanette M. Wing ist Corporate Vice President bei Microsoft Research und zuständig für die weltweite Grundlagenforschung. Bis 2013 arbeitete sie als Professorin für Informatik an der Carnegie Mellon Universität in Pittsburgh, USA. Außerdem war sie von 2007 bis 2010 Assistant Director der Abteilung für Informatik, Informationswissenschaften und Technik der National Science Foundation (NSF). Jeanette Wing studierte Elektrotechnik und Informatik am MIT (B. Sc., M. Sc. 1979) und wurde dort in Informatik promoviert (1983). Seitdem leitete sie zahlreiche Forschungsprojekte und veröffentlichte eine Vielzahl von Publikationen. Sie ist ein führendes Mitglied der Formal Methods Community und eine engagierte Förderin des Computational Thinking. Im März 2010 hielt sie den Hauptvortrag beim Eröffnungs-Kolloquium des HITS. Seit 2014 ist sie Mitglied des Wissenschaftlichen Beirats des HITS.



Prof. Dr. Alex Szalay, HITS Scientific Advisory Board

Alex Szalay ist Bloomberg Distinguished Professor in den Fachbereichen für Physik und Astronomie sowie für Informatik der Johns Hopkins Universität in Baltimore, USA. Er ist außerdem Direktor des „Institute for Data Intensive Engineering and Science“. Alex Szalay verfasste viele wegweisende Arbeiten über die Strukturbiologie im Universum und die Eigenschaften dunkler Materie. Szalay wurde in Ungarn geboren und erhielt 1975 seinen Dokortitel in Astrophysik an der Eötvös Loránd Universität in Budapest. Er verbrachte seine Zeit als Postdoc in Berkeley und am Fermilab und kehrte 1982 als Assistenzprofessor nach Budapest zurück. Im Jahr 1989 wechselte er schließlich zur Johns Hopkins Universität. Alex Szalay ist vor allem für seine maßgebliche Rolle bei der Sicherung des Erfolgs der „Sloan Digital Sky Survey“ bekannt. Außerdem gehörte er zum Kernteam des „Galaxy Zoo“-Projekts. Für seine wissenschaftlichen Beiträge hat er zahlreiche Auszeichnungen erhalten. Seit 2014 ist Alex Szalay Mitglied des Wissenschaftlichen Beirats des HITS.

IMPRESSUM | DR. PETER SAUERESSIG (VISDP), SAUERESSIG@HITS.ORG, TEL. +49 - 6221 - 533 245
FOTOS: HITS, NSF/CMU, GÜLAY KESKIN, WOLFGANG MÜLLER | WWW.HITS.ORG

PORTRAIT

NO 24 | 09-2016

THE CHARTS

Heidelberg Institute for
Theoretical Studies

