Alumnitreffen am HITS

Am 30. Juni und 1. Juli 2017 fand das Alumnitreffen am HITS statt. Zum Auftakt der zweitägigen Veranstaltung sprach der Alumnus **Prof. Stefan Wuchty** (University of Miami, USA) im Rahmen eines öffentlichen Kolloquiums über statistische Methoden zur Erforschung von Gruppenverhalten in sozialen Netzwerken. Danach berichteten die drei Ehemaligen **Dr. Katja Filippov**a (Natural Language Processing), **Dr. Jon Fuller** (Molecular and Cellular Modeling) und **Dr. Fernando Izquierdo-Carrasco** (Scientific Computing) über ihre Berufswege. Am zweiten Tag der Veranstaltung kamen die HITS Alumni und die „aktiven" HITS-Köpfe zu einem großen Fest auf dem HITS Campus zusammen. Insgesamt nahmen mehr als 100 Alumni und „HITS-Köpfe" an der Veranstaltung teil.

Neue Ausschreibung: „HITS Journalist in Residence"

Das Programm „HITS Journalist in Residence" wurde jetzt neu international ausgeschrieben. Es bietet Wissenschaftsjournalisten die Möglichkeit, durch einen längeren Aufenthalt am Institut mehr über rechnergestützte, datengetriebene Forschung von Molekularbiologie bis Astrophysik zu erfahren. **Einsendeschluss** für die Bewerbungen ist der **15. November 2017.** Die letzte Journalistin am HITS war die Inderin **T.V. Padma** aus Delhi (siehe „Portrait").

HEIDELBERG LAUREATE FORUM

HITS ist wissenschaftlicher Partner des Heidelberg Laureate Forum vom 24. bis 29. September 2017. Auch in diesem Jahr werden wir eine Gruppe junger Forscher am Institut begrüßen.

HITS-Mathematikerin ausgezeichnet

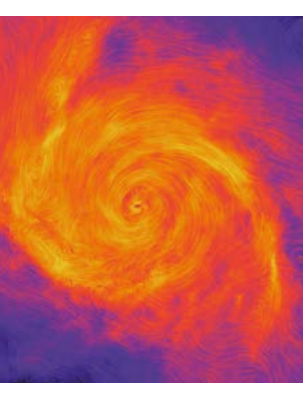
Prof. Anna Wienhard, Leiterin der assoziierten Groups and Geometry (GRG) Gruppe, wurde als Referentin zum nächsten „International Congress of Mathematicians" eingeladen, der 2018 in Rio de Janeiro (Brasilien) stattfindet. Der Kongress ist die größte internationale Veranstaltung für Mathematik. Er wird alle vier Jahre von der „International Mathematical Union" veranstaltet. Die Einladung als Referentin ist eine der höchsten Anerkennungen für Leistungen in der Mathematik. Anna Wienhard wurde außerdem als ordentliches Mitglied in die Heidelberger Akademie der Wissenschaften, Mathematisch-naturwissenschaftliche Klasse, gewählt. Sie untersucht mit ihrer Forschungsgruppe Symmetrien und sogenannte Deformationsräume in geometrischen Strukturen.

Zwei „Fellowships" für HITS-Statistiker

Prof. Tilmann Gneiting, Leiter der Computational Statistics (CST) Gruppe, wurde von der American Statistical Association (ASA) zum „Fellow" ernannt. Die ASA verwendet den Titel als höchste Auszeichnung für ihre Mitglieder bereits seit fast 100 Jahren. Tilmann Gneiting ist einer von insgesamt nur vier Wissenschaftlern außerhalb der USA, denen in diesem Jahr diese Ehre zu Teil wird. Er wurde außerdem als Fellow vom Europäischen Zentrum für mittelfristige Wettervorhersage (ECMWF) für drei weitere Jahre bestätigt. Tilmann Gneitings Forschung konzentriert sich auf statistische Methodologie, Wahrscheinlichkeitstheorie und Vorhersagen.

Neue Mitarbeiter und Gastwissenschaftler

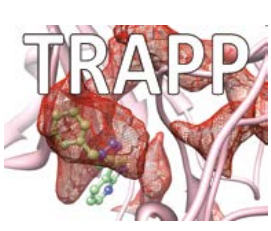
DMQ: Nils Schween, Gastwissenschaftler *(Universität Heidelberg)*
GRG: Beatrice Pozzetti, Valentina DiSarlo, Gastwissenschaftlerinnen *(beide Universität Heidelberg)*
MBM: Dr. Fan Jin, Gastwissenschaftler *(Universität Heidelberg)*
MCM: Marcus Fabiano de Almeida Mendes, Gastwissenschaftler *(Federal University of Rio Grande do Sul, Brasilien)*
TAP: Jesus Prada Gonzalez, Gastwissenschaftler *(University of los Andes, Kolumbien)*
Verwaltung: Thomas Rasem, Controlling



„Auriga" enthüllt die Geschichte von Galaxien

Mit tausenden Prozessoren, Terabytes an Daten und Monaten an Rechenzeit hat eine internationale Forschergruppe die bisher größten und hochauflösendsten Simulationen von Galaxien wie unserer Milchstraße erstellt. Im Rahmen des „Auriga"-Projekts wurden unter der Leitung von HITS-Forscher **Dr. Robert Grand** (TAP) 30 verschiedene Milchstraßen in hoher Auflösung simuliert. Die Simulationen nutzten rund 18 Millionen CPU-Stunden auf den Supercomputern „Hornet"/„Hazel Hen" in Stuttgart und „SuperMUC" in Garching. Erstmals wurden auch magnetische Felder simuliert, die das sogenannte interstellare Medium zwischen den Sternen durchdringen. Das Team fand heraus, dass kleinere Galaxien in der frühen Entstehungsgeschichte mit der Milchstraßen-Galaxie verschmolzen sein könnten. Durch diesen Prozess kann eine größere Spiralgalaxie entstehen. Nun vergleichen die Wissenschaftler ihre Ergebnisse mit Beobachtungsdaten wie denen der Gaia Mission. Dadurch wollen sie besser verstehen, wie diese Verschmelzungen die Entstehung unserer und anderer Galaxien bestimmt haben.

Publikation: „The Auriga Project: The Properties and Formation Mechanisms of Disc Galaxies Across Cosmic Time," Robert J. J. Grand et al., 2017 May, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, vol. 467, pp. 179-207.



Neuer "TRAPP"-Server

Die Molecular and Cellular Modeling (MCM) Gruppe hat einen neuen Webserver für die Software-Plattform „TRAPP" (**T**ransient **P**ockets in **P**roteins) veröffentlicht. Die automatische Plattform hilft der Wirkstoffforschung bei der Suche, Analyse und Visualisierung von Bindungstaschen. Der neue Webserver stellt eine nutzerfreundliche Umgebung für Forscher bereit.

Publikation: Antonia Stank, Daria B. Kokh, Max Horn, Elena Sizikova, Rebecca Neil, Joanna Panecka, Stefan Richter and Rebecca C. Wade. TRAPP webserver: predicting protein binding site flexibility and detecting transient binding pockets. Nucleic Acids Res (2017) gkx277. http://trapp.h-its.org/

T.V. Padma: „Ohne Druck durch Deadlines neue Dinge lernen."

Sie steigt die Treppe zum Eingangstor hinauf, bleibt plötzlich stehen und blickt zurück auf den grünen Garten und das rote Klinkergebäude. „Diesen Ort zu verlassen macht mich irgendwie traurig", bekennt T.V. Padma. Die indische Wissenschaftsjournalistin ist die sechste „Journalist in Residence" am HITS und kehrt nun nach fünf Monaten am Institut nach Delhi zurück.Padma schreibt als freie Wissenschaftsjournalistin „Nature", „New Scientist", „Physics World" und andere Medien. Sie war Wissenschaftskorrespondentin der führenden Nachrichtenagentur Indiens, Press Trust of India (PTI), und Redaktionsleiterin des ersten Südasien-Regionalbüros von SciDev.Net. Die Jury wählte sie als HITS „Journalist in Residence" 2017 unter 40 Kandidaten aus 23 Ländern aus.

Eigene Projekte während des Aufenthalts gestartet

„Dieses Programm bietet eine sehr seltene Chance", erklärt sie. „Das journalistische Leben ist ein verrückter Wettlauf nach Deadlines unter Hochdruck. Fünf Monate lang lag mein Fokus nicht auf diesen Deadlines, sondern darauf, neue Dinge zu lernen." Padma nahm an wissenschaftlichen Treffen teil, unterhielt sich mit HITS-Gruppenleitern, traf deutsche und europäische Wissenschaftsjournalisten und verbrachte heitere Mittagspausen mit der Astroinformatik-Gruppe. „Ich lernte einiges darüber, wie man mit Daten umgeht", schmunzelt sie. „Das half mir dabei, meine eigenen Datenjournalismusprojekte zu planen." Außerdem gab sie ein internes Seminar über soziale Medien für die „HITS-Köpfe" und hielt einen öffentlichen Vortrag über Wissenschaft und Wissenschaftsjournalismus in Indien. Auch Heidelberg lernte sie besser kennen. „Zuerst entsprach es ganz dem Klischee als Postkartenidyll", sagte sie in einem Interview mit der Lokalzeitung. „Aber bald merkte ich, dass diese Stadt voller Wissenschaft ist, ein idealer Ort für eine Wissenschaftsjournalistin."
Padma kehrt nach Delhi zurück mit einigen Projekten im Gepäck, die sie am HITS begonnen hat. Darunter ist eine Datenuntersuchung extremer Wetterereignisse in der Himalaya-Region, an der sie gemeinsam mit der Computational Statistics Gruppe arbeiten will. „Das hier war wahrscheinlich die wundervollste Zeit in meinem gesamten Berufsleben", sagt sie und nimmt die letzten Stufen bis zum Tor.

Bewerbungsschluss für das „Journalist in Residence" Programm: 15. November 2017

Impressum | Dr. Peter Saueressig (ViSoP), Saueressig@h-its.org, Tel. +49 6221 533 245 | Fotos: HITS | Gülay Keskin – www.h-its.org

HITS Alumni Meeting

The HITS alumni meeting took place on June 30 and July 1, 2017. The two-day event was launched at a public colloquium by HITS alumnus **Prof. Stefan Wuchty** (University of Miami, USA) who spoke on quantifying group dynamics in online social media. HITS alumni **Dr. Katja Filippova** (Natural Language Processing), Dr. Jon Fuller (Molecular and Cellular Modeling) and **Dr. Fernando Izquierdo-Carrasco** (Scientific Computing) subsequently discussed their career paths with the current HITSters. The second day was all about bringing together the HITS Alumni and current HITSters for a big family party on the HITS campus. Altogether, more than 100 alumni and HITSters participated in the event.

New call for HITS "Journalist in Residence"

HITS has published a new call for its international "Journalist in Residence" program which offers science journalists the opportunity to spend up to six months at the institute discovering more about computer-aided, data-driven research in areas ranging from molecular biology to astrophysics. **The deadline for applications is November 15, 2017.** See the "Portrait" section for more about the last journalist in residence, **T.V. Padma** from Delhi/India.

HEIDELBERG LAUREATE FORUM

HITS is one of the scientific partners in the Heidelberg Laureate Forum, September 24 – 29, 2017. This year, once again, we will host a group of young researchers at the institute.

HITS

HITS mathematician honored

Prof. Anna Wienhard, leader of the associated "Groups and Geometry" group, has been invited to give a presentation at the 2018 International Congress of Mathematicians (ICM) in Rio de Janeiro, Brazil. Hosted every four years by the International Mathematical Union, the ICM is the largest international gathering in mathematics. An invitation to hold a lecture at the ICM is one of the most prestigious acknowledgements of research achievements in mathematics. Anna Wienhard has also been elected a full member of the mathematics and natural sciences section of the Heidelberg Academy of Sciences and Humanities. Together with her research group, she investigates symmetries and so-called deformation spaces in geometric structures.

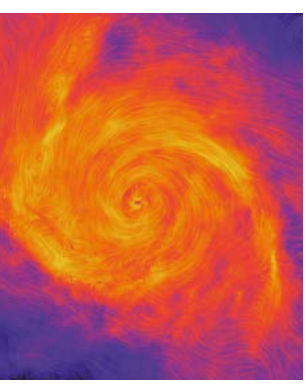
Two fellowships for HITS statistician

Prof. Tilmann Gneiting, leader of the "Computational Statistics" group, has been named a Fellow of the American Statistical Association (ASA). The ASA has been using the title as its highest honorary grade of membership for nearly 100 years. Tilmann Gneiting is one of only four scientists outside the USA to have received the honor this year. The European Centre for Medium-Range Weather Forecasts (ECMWF) has also confirmed Tilmann Geiting as an ECMWF Fellow for a further three years. His research focuses on statistical methods and the science of probabilistic forecasting.

New staff members and visiting scientists

DMQ: Nils Schween, visiting scientist *(Heidelberg University)*
GRG: Beatrice Pozzetti, Valentina DiSarlo, visiting scientists *(both Heidelberg University)*
MBM: Dr. Fan Jin, visiting scientist *(Heidelberg University)*
MCM: Marcus Fabiano de Almeida Mendes, visiting scientist *(Federal University of Rio Grande do Sul, Brazil)*
TAP: Jesus Prada Gonzalez, visiting scientist *(University of Los Andes, Colombia)*
Administration: Thomas Rasem, Controlling

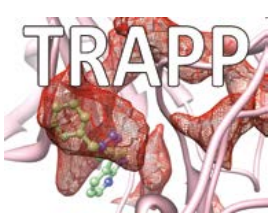
HITSTERS



"Auriga" uncovers the history of galaxies

With thousands of processors, terabytes of data, and months of computing time, an international group of researchers has produced some of the largest and highest resolution simulations ever made of galaxies like our Milky Way. In the "Auriga" project, the team led by HITS scientist **Dr. Robert Grand** (TAP) simulated 30 different high-resolution Milky Ways using some 18 million CPU hours on the supercomputers "Hornet"/"Hazel Hen" in Stuttgart and "SuperMUC" in Garching. It was the first time the magnetic fields that permeate the so-called interstellar medium were simulated. The team discovered that smaller galaxies could have merged with the Milky Way galaxy early in its history, in a process that could have created larger spiral discs. The scientists are now combining the results of the Auriga Project work with observation data from missions like Gaia to better understand how mergers and collisions shaped galaxies like our own.

Publication: "The Auriga Project: The Properties and Formation Mechanisms of Disc Galaxies Across Cosmic Time," Robert J. J. Grand et al., 2017 May, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, vol. 467, pp. 179-207.



New "TRAPP" Server

The Molecular and Cellular Modeling (MCM) group has published a new webserver for the software platform "TRAPP" (**T**ransient **P**ockets in **P**roteins). The platform helps drug discovery researchers to search, analyze and visualize binding pockets in proteins. The new webserver provides a user-friendly environment.

Publication: Antonia Stank, Daria B. Kokh, Max Horn, Elena Sizikova, Rebecca Neil, Joanna Panecka, Stefan Richter and Rebecca C. Wade. TRAPP webserver: predicting protein binding site flexibility and detecting transient binding pockets. Nucleic Acids Res (2017) gkx277. http://trapp.h-its.org/

RESEARCH

T.V. Padma: "A focus not on deadlines, but on learning new things."

She walks up the steps to the entrance gate, stops suddenly and turns around to look back on the green garden and the red brick building. "I'm really rather sad to be leaving this place," T.V. Padma confesses. The Indian science journalist is now returning to Delhi after spending five months as the 6th journalist in residence at HITS. Padma is a freelance science journalist who writes for Nature, New Scientist, Physics World, and other media outlets. She was a science correspondent for India's leading news agency, Press Trust of India (PTI), and editor-in-chief of the first South Asian regional office of SciDev.Net. She was selected as the 2017 HITS journalist in residence out of 40 candidates from 23 countries.

New projects launched during her stay

"This program is a rare opportunity," she explains. "Life as a journalist is a mad rush for deadlines, under high pressure. For five months, my focus was not on deadlines, but on learning new things." Padma attended scientific meetings, had conversations with HITS group leaders, met several German and other European science journalists, and enjoyed cheerful lunch breaks with the Astroinformatics group. "I learned a lot about how to deal with data," she smiles. "It helped me to set up my own data journalism projects." She also held an internal seminar with the HITSters on social media and gave a public talk on science and science journalism in India. And she got to know Heidelberg better. "At first it fulfilled all the clichés of a picture postcard," she said in an interview with the local newspaper. "But soon I discovered that this city is full of science, an ideal place for a science journalist."

Padma is returning to Delhi with some new projects that started at HITS. One is to investigate data on extreme weather events in the Himalaya region together with the Computational Statistics group. "This was probably one of the most wonderful phases of my whole professional life," she says, ascending the last steps to the gate.

HITS Journalist in Residence program – deadline for applications: November 15, 2017

Imprint | Dr. Peter Saueressig (ViSdP), saueressig@h-its.org, Tel. +49 6221 533 245, Photos: HITS, Gülay Keskin | www.h-its.org

PORTRAIT