



Der Leiter der TAP-Forschungsgruppe, Prof. Volker Springel, erhält einen "Starting Grant" des Europäischen Forschungsrates (ERC). Mit der beantragten Fördersumme von knapp 1,5 Millionen Euro für die nächsten fünf Jahre will Springel noch präzisere Computersimulationen zur Entstehung von Galaxien erstellen.

Der ERC Starting Grant wird an hervorragende Wissenschaftler in ganz Europa vergeben. Die Bewerber müssen einen exzellenten Forschungsantrag einreichen und außerdem eine bisher beeindruckende und weiterhin vielversprechende wissenschaftliche Laufbahn nachweisen. Volker Springel ist einer der meistzitierten Autoren in seinem Fachgebiet und spätestens seit der Millennium-Simulation auch einer breiteren Öffentlichkeit bekannt.

Das Ziel des geförderten Projekts ist es, mehr Details der physikalischen Prozesse der Galaxienentstehung zu simulieren und dann verstehen zu können. Dazu sollen Simulationen mit bisher unerreichter Präzision und Auflösung auf den weltweit größten und leistungsfähigsten Computer eingesetzt werden. In mehreren Teilprojekten will Volker Springel mit seinem Team die Simulationen für die kommende Generation von Supercomputern, die so genannten Exaflop-Systeme, anpassen.

HITS-Kolloquien im Herbst

15.10. Jun.-Prof. Dr. Bernhard Höfle (Universität Heidelberg)

22.11. Prof. Dr. Helmut Grubmüller (Max-Planck-Institut für biophysikalische Chemie Göttingen)

HITS bei "Explore Science"



Unter dem Motto "Schneller, stärker, besser - mit Mathe!" nahm das HITS im Juni mit drei Mitmachstationen an "Explore Science" teil, den naturwissenschaftlichen Erlebnistagen der Klaus Tschira Stiftung im Mannheimer Luisenpark. Mitarbeiter der Forschungsgruppen MCM, MBM und SDBV zeigten, welche Rolle Mathematik bei der Lösung naturwissenschaftlicher Probleme spielt.

Außerdem präsentierte das HITS eine Original "Enigma"-Chiffriermaschine (Leihgabe: Heinz Nixdorf MuseumsForum, Paderborn) und erinnerte damit an den Mathematiker Alan Turing, der am 23. Juni 2012 hundert Jahre alt geworden wäre. "Explore Science" zog in diesem Jahr mehr als 56 000 Besucher an.

Professur für Alexandros Stamatakis

Dr. Alexandros Stamatakis, Leiter der Forschungsgruppe SCO, wurde im Juli zum W3-Professor für High Performance Computing in den Lebenswissenschaften an der Fakultät für Informatik des Karlsruher Instituts für Technologie (KIT) ernannt. Durch diese Professur will das KIT seine bestehende Kompetenz im Bereich High Performance Computing (HPC) besonders in den Lebenswissenschaften stärken. Der Dienstort der Professur ist am HITS. (Mehr zu Alexandros Stamatakis im "Portrait".)

Neue Gastwissenschaftler und neue Mitarbeiter

Dr. Richard Henchman, Lecturer an der University of Manchester, kam im Juni/Juli zu einem einmonatigen Gastaufenthalt in der MBM-Gruppe (Dr. Frauke Gräter). Seit Mitte August arbeitet die Doktorandin Beifei Zhou (CAS, Shanghai) als Gastwissenschaftlerin in der MBM-Gruppe.

Mitgliedschaften

HITS-Geschäftsführer Prof. Andreas Reuter ist neues Mitglied des International Advisory Board des mit 45 Millionen US-Dollar finanzierten "Info-Energy and Social Services Project" an der University of Tokyo. Außerdem wurde er zum Mitglied der Initiative "Weiterentwicklung der IKT Baden-Württemberg" ernannt.

HITSKÖPFE

HITS und KAIST: Zusammenarbeit und Austausch



In diesem Sommer haben das HITS und das Korea Advanced Institute of Science and Technology (KAIST) ein Abkommen zur Förderung von wissenschaftlicher Zusammenarbeit und Austausch unterzeichnet. Die Zusammenarbeit schließt vor allem Computerlinguistik und verwandte Fachgebiete ein und findet zwischen der Natural Language Processing-Gruppe (Leitung: Prof. Michael Strube) und der Web Science & Technology Division des KAIST (Leiter: Prof. Sung-Hyon Myaeng) statt. Das Abkommen schließt auch einen Forscher- und Studentenaustausch mit bis zu 5 Teilnehmern pro Jahr ein. Das KAIST mit Sitz in Daejeon wurde 1971 von der südkoreanischen Regierung gegründet und war die erste wissenschaftliche und ingenieurwissenschaftliche Forschungseinrichtung in Südkorea. Im QS World University Ranking 2011 war KAIST unter den besten 30 Universitäten der Welt für Ingenieurwissenschaften und Informatik.

Neue Gestaltung für SABIO-RK

SABIO-RK (sabio.h-its.org) ist eine Datenbank für biochemische Reaktionskinetik, die von der SDBV-Gruppe (Leitung: Dr. Wolfgang Müller) entwickelt wurde. Die Datenbank wurde kürzlich grundlegend neu gestaltet, besonderes Augenmerk galt dabei den Suchfunktionen der SABIO-RK. Der Nutzer kann jetzt zwischen einem einzeiligen Eingabefeld im Google-Stil und einem Formular wählen, das ihn dabei unterstützt, komplexere Datenbankabfragen zu stellen. "Diese neue Benutzeroberfläche wird von Testnutzern akzeptiert, und solche Suchmasken sind im Alltag gebräuchlich", sagt Gruppenleiter Dr. Wolfgang Müller. "Wir untersuchen jedoch zusätzlich Stärken und Schwächen des Systems mit einer "Eye-tracking"-Studie in Zusammenarbeit mit der DHBW Mosbach." Ein "eye-tracking"-System misst, wohin ein Nutzer schaut, wenn er die Datenbank nutzt. Ein solches System wird neue wichtige Erkenntnisse liefern, wie Nutzer die Abfrageformulare und -ergebnisse analysieren und nutzen.

FORSCHUNG

Alexandros Stamatakis: "Algorithmen und Software für die Evolutionsforschung" Warum interessiert sich der Informatiker Alexandros Stamatakis für Stammbäume von Pflanzen oder



Insekten? "Die Evolutionsbiologie produziert ungeheuer viele Daten, die selbst Höchstleistungsrechner nicht ohne Weiteres bewältigen können", sagt der Wissenschaftler. "Eine aktuelle Herausforderung für die Informatik besteht darin, Programme und Methoden zu entwickeln, um aus der molekularen Datensuppe möglichst effizient wichtige Informationen herauszufischen." Mit diesem Problem befasst sich der Leiter der 15-köpfigen HITS-Forschungsgruppe "Scientific Computing" (SCO) schon seit seiner Doktorarbeit. Alexandros Stamatakis wurde 1976 in Deutschland geboren, wuchs in Athen auf, studierte Informatik

in München, Lyon, Paris und Madrid, promovierte 2004 an der TU München. Nach zwei Postdoc-Stationen auf Kreta und an der ETH in Lausanne leitete er ab 2008 an der LMU, dann an der TU München eine Emmy-Noether-Nachwuchsforschungsgruppe. Seit Oktober 2010 ist Stamatakis am HITS. In diesem Jahr wurde er Adjunct Professor am Department of Ecology and Evolutionary Biology der University of Arizona in Tucson (USA). Ebenfalls in diesem Jahr berief ihn die Fakultät für Informatik des Karlsruher Instituts für Technologie (KIT) auf die neu eingerichtete Professur für High Performance Computing in den Lebenswissenschaften. Sein primäres Forschungsziel ist es, neue Erkenntnisse zur evolutionären Entwicklung aller Lebewesen durch die Rekonstruktion von immer größeren genetischen Stammbäumen zu ermöglichen. Der Infor-

matiker entwickelte dafür zum Beispiel das Programm RAxML, das Evolutionsbiologen bereits für über 4000 Stammbaumberechnungen nutzten. Gemeinsam mit Forschungspartnern der US-Universitäten Yale und Brown rekonstruierte Alexandros Stamatakis mit RAxML den weltweit größten Stammbaum der Pflanzen mit über 55.000 Spezies. Seine

Gruppe ist auch am internationalen Forschungsprojekt "1KITE" beteiligt, um die evolutionären Mechanismen der Entstehung von über 1000 Insektenarten zu entschlüsseln. Und er hat noch mehr vor: "In den nächsten Jahren will ich Methoden des wissenschaftlichen Rechnens als festen Bestandteil der Evolutionsbiologie etablieren."

IMPRESSUM | DR. PETER SAUERESSIG (VISDP), SAUERESSIG@H-ITS.ORG | TEL. +49 - 6221-533 245 FOTOS: HITS / BERNHARD KREUTZER | WW



1.5 Million Grant for HITS Astrophysicist Volker Springel



Theoretical Astrophysics research group leader Prof. Volker Springel is to receive a Starting Grant from the European Research Council (ERC). Springel plans to spend the grant money of ca. €1.5 mio on performing more precise computer simulations of galaxy formation.

The ERC Starting Grant is accessible to young researchers from all over Europe. Applicants must submit an excellent research proposal and demonstrate an outstanding and highly promising scientific career. Volker Springel is one of the most frequently cited authors in his field and even became known to the wider public through the results of his Millennium Simulation.

The aim of his new project is to simulate the physical processes of galaxy formation in greater detail and to gain a better understanding of them. To this end, simulations with an unprecedented precision and resolution will be performed on the largest and most powerful computers in the world. In a set of sub-projects, Volker Springel and his team intend to enhance their software, so it can run on the next generation of supercomputers, so-called ExaFLOPS systems.

HITS Colloquia in Fall 2012

15.10. Jun.-Prof. Dr. Bernhard Höfle (Heidelberg University) 22.11. Prof. Dr. Helmut Grubmüller (Max Planck Institute for Biophysical Chemistry, Göttingen)



HITS at Explore Science



"Faster, stronger, better – with maths!" HITS contributed to Explore Science, the hands-on science event organized by the Klaus Tschira Foundation which took place in Mannheim in June. Members of the MCM-, MBM- und SDBV-groups illustrated the role of mathematics in solving scientific problems. Moreover, HITS presented a genuine Enigma encoding machine from the Heinz Nixdorf MuseumsForum in Paderborn in remembrance of Alan Turing, a mathematician who would have turned 100 on June 23, 2012. This year's Explore Science was attended by more than 56,000 visitors.

Dr. Alexandros Stamatakis, SCO group leader, was appointed to a new W3 Chair for High Performance Computing for the Life Sciences (Department of Informatics) at the Karlsruhe Institute of Technology (KIT). By creating this Chair, which is funded by the Klaus Tschira Foundation, KIT intends to strengthen its competencies in the area of high performance computing (HPC), especially in the life sciences. The place of employment is at HITS. (Read more on Alexandros Stamatakis in the Portrait section).

New Visiting Scientists and New Staff Members

Professorship for Alexandros Stamatakis

From June to July **Dr. Richard Henchman**, Lecturer at the University of Manchester, joined the MBM group of Dr. Frauke Gräter as a visiting scientist. Since mid-August, the doctoral student **Beifei Zhou** (CAS, Shanghai) has been working in the MBM group.

Appointments

Prof. Andreas Reuter, Managing Director of HITS, is a new member of the International Advisory Board for the "Info-Energy and Social Services Project" at the University of Tokyo, Japan. The project is funded with a total sum of USD 45 million. Moreover, he has been appointed member of the initiative "Weiterentwicklung der IKT Baden-Württemberg".



HITS and KAIST: Collaboration and Exchange



This summer, HITS has concluded an agreement with the Korea Advanced Institute of Science and Technology (KAIST) to promote scientific collaboration and visitor exchange between the two institutions. The collaboration focuses on computational linguistics and adjacent areas, involving the Natural Language Processing group of **Prof. Michael Strube** and the Web Science & Technology Division of KAIST (head: Prof. Sung-Hyon Myaeng). The agreement comprises the exchange of scientists and students with up to five participants a year.

Located in Daejeon, KAIST was established by the South Korean government in 1971 as the nation's first research oriented science and engineering institution. In the QS World University Ranking 2011, KAIST was among the top 30 universities in engineering and IT worldwide.

New design for SABIO-RK

SABIO-RK (sabio.h-its.org), the reaction kinetics database developed and provided by the SBDV group of **Dr. Wolfgang Müller**, has undergone a major redesign greatly simplifying the way SABIO-RK is queried. Now the user can choose between a "Google style" one-line search and a form-based search which guides the users to successfully formulate more complex queries. "While this new interface is well-accepted with test users, and similar interfaces are common in everyday use, we are further investigating the strengths and weaknesses of the system in an eye tracking study in collaboration with DHBW Mosbach", group leader Dr. Wolfgang Müller says. An eye tracker is a system that measures what a user is looking at while using the system. Using an eye tracker will provide important new insights into the way users analyze and use SABIO-RK's forms and search results.



Alexandros Stamatakis: "Algorithms and Software for Evolutionary Research." Why is Alexandros Stamatakis, a computer scientist by training, interested in evolutionary trees of plants



and insects? "Evolutionary biology generates a huge amount of data which even high-performance computers cannot process without substantial code adaptations", he says. "A current challenge for computer science is to develop programs and methods that allow for extracting important information from the molecular data soup in the most efficient way possible." The head of the Scientific Computing (SCO) group, a team of 15 staff members, has been working on this problem since his doctoral thesis. Alexandros Stamatakis was born in Germany in 1976 and grew up in Athens. He studied Computer Science in Munich, Lyon, Paris, and Madrid and received his PhD from the TU Munich in 2004. After PostDocs in Crete and at the ETH in Lausanne, he started an Emmy Noether junior research group in 2008, first at the LMU, then at the TU Munich. He has been working at HITS since October 2010. This year, he was appointed as Adjunct Professor at the Department of Ecology and Evolutionary Biology at the University of Arizona in Tucson (US) and as full professor of Computer Science in the area of "High Performance Computing for the Life Sciences" at the Karlsruhe Institute of Technology (KIT). His primary goal is to gain new insights into the evolutionary development of all beings by reconstructing

even larger evolutionary trees (phylogenies) using molecular data. He is well-known for developing a software called RAxML, which is used by evolutionary biologists all over the world; over 4,000 different phylogenies have been computed and published to date using RAxML.

Together with research partners at Yale University and Brown University (US), Alexandros Stamatakis used RAxML to reconstruct the largest phylogeny of plants to date, comprising over 55,000 species. His

group is also part of the international research project 1KITE that aims at unraveling the evolutionary mechanisms that generated over 1000 insect species.

And there is more to come. "In the next few years, I would like to establish scientific computing methods as a substantial part of evolutionary biology", he says.

IMPRINT | DR. PETER SAUERESSIG (VISDP), SAUERESSIG@H-ITS.ORG | TEL. +49 - 6221-533 245

PICTURES: HITS / BERNHARD KREUTZER | WWW.H-ITS.ORG

