

ERC Advanced Grant für HITS-Forscherin

Die Mathematikerin **Anna Wienhard**, Leiterin der Gruppe „Groups and Geometry“ am HITS, erhielt jetzt vom Europäischen Forschungsrat (ERC) einen ERC Advanced Grant. Für ihr



Projekt zu Symmetrien in der Mathematik stellt der Europäische Forschungsrat Fördermittel in Höhe von rund zwei Millionen Euro über einen Zeitraum von fünf Jahren zur Verfügung. Anna Wienhard ist zugleich Professorin am Mathematischen Institut der Universität Heidelberg, die auch als gastgebende Einrichtung des ERC Grants fungiert.

Anna Wienhard erhielt bereits 2014 einen ERC Consolidator Grant für ihre Arbeiten zu Symmetrien und Deformationsräumen geometrischer Strukturen. Ihr aktuelles Forschungsvorhaben „PosLieRep – Positivity in Lie Groups and Representation Varieties“ baut darauf auf und befasst sich zentral mit sogenannten Lie-Gruppen, die auf vielen Gebieten der Mathematik eine zentrale Rolle spielen und ein wichtiges Werkzeug der theoretischen Physik sind.

„Diese Auszeichnung freut uns außerordentlich“, so HITS-Geschäftsführerin **Gesa Schönberger**. „Sie ist auch ein klares Zeichen für die enge

Zusammenarbeit mit der Universität.“ Insgesamt arbeiten nun vier aktuelle ERC-Preisträger am HITS.

Seit 2012 ist Anna Wienhard Professorin an der Universität Heidelberg. Am Mathematischen Institut leitet sie neben der Arbeitsgruppe Differentialgeometrie auch die Forschungsstelle Geometrie und Dynamik. Darüber hinaus ist sie Co-Sprecherin des Exzellenzclusters STRUCTURES und Mitglied des Interdisziplinären Zentrums für Wissenschaftliches Rechnen. Seit 2015 forscht sie zugleich als Leiterin der Gruppe „Groups and Geometry“ am HITS. Seit Oktober 2020 ist sie „Scientific Chairperson“ der Heidelberg Laureate Forum Foundation, die das jährliche „Heidelberg Laureate Forum“ veranstaltet, ein Netzwerktreffen, das die Träger/-innen der renommiertesten Auszeichnungen in Mathematik und Informatik mit 200 herausragenden Nachwuchsforschenden dieser Fachgebiete zusammenbringt.



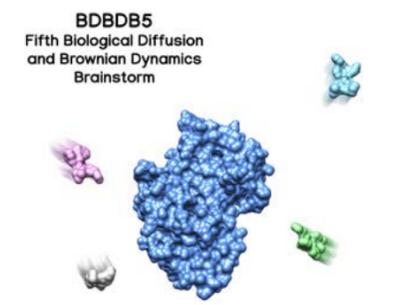
Via Data

Der HITS Blog ist auf dem Portal „Scilogs“ <https://scilogs.spektrum.de/via-data/> zu finden.

HITS

BDBDB5: Online Workshop

Vom 24. bis 25. März 2021 fand der 5. „Biological Diffusion and Brownian Dynamics Brainstorm“, kurz: BDBDB5, als Online-Veranstaltung statt, mit einem neuen Teilnehmerrekord. **Rebecca Wade**, **Stefan Richter**, **Ariane Nunes-Alves** und **Abraham Muniz** (alle MCM) organisierten den Workshop gemeinsam mit Rommie Amaro and Lane Votapka von der University of California San Diego, USA. Seit 2007 hat sich „BDBDB“ als Plattform für Präsentationen und informelle Diskussionen über die aktuelle Entwicklung experimenteller und theoretischer Studien über biologische Diffusion etabliert, mit einem Schwerpunkt auf die Brown-



sche Dynamik zur Simulation von biologischen Makromolekülen. In einer Umfrage am Ende der Veranstaltung plädierte die Mehrheit der Teilnehmer dafür, dass die Treffen künftig öfter stattfinden sollten.

Stamatakis “associate editor” in Fachjournal “Bioinformatics Advances”

CME-Gruppenleiter **Alexandros Stamatakis** wurde zum associate editor der “Bioinformatics Advances” ernannt, ein interdisziplinäres Fachjournal für Bioinformatik und computergestützte Biologie. Es umfasst bioinformatische Methoden wie Algorithmen, Statistik, Datenbanken und Software, aber auch biologische Beiträge, für die die Anwendung neuartiger computergestützter Methoden unverzichtbar ist. Der Hauptschwerpunkt liegt auf molekularer und zellulärer Biologie.

Neue Mitarbeiter/-innen und Gastwissenschaftler/-innen

AIN: Francisco Pozo Nunez, wissenschaftlicher Mitarbeiter
CCC: Juliette Schleicher, Masterandin
CME: Dimitri Höhler, Doktorand; Julia Schmid, Masterandin
DMQ: Jonas Roller, Doktorand
GRG: Fernando Camacho Cadena, Doktorand
MCM: Giulia D’Arrigo, Postdoktorandin; Anna Mazurek, Gastwissenschaftlerin (Medizinische Universität Warschau, Polen); Giulia Paleari, Postdoktorandin; Jonathan Teuffel, Masterand

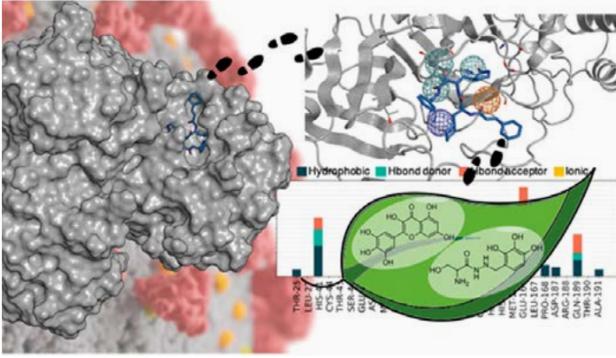
MBM: Jannik Buhr, Gastwissenschaftler (Universität Heidelberg); Christoph Karfusehr, Masterand; Aysecan Ünal, Masterandin
NLP: Wei Zhao, Gastwissenschaftler (TU Darmstadt)
SDBV: Lukrécia Mertová, Doktorandin
TOS: Teresa Braun, Masterandin
Verwaltung: Barbara Port, Wissenschaftliche Referentin

HITS Gruppen (06/2021): Astrominformatics (AIN), Computational Carbon Chemistry (CCC), Computational Molecular Evolution (CME), Computational Statistics (CST), Data Mining and Uncertainty Quantification (DMQ), Groups and Geometry (GRG), Molecular Biomechanics (MBM), Molecular and Cellular Modeling (MCM), Natural Language Processing (NLP), Physics of Stellar Objects (PSO), Scientific Databases and Visualization (SDBV), Stellar Evolution Theory (SET), Theory and Observations of Stars (TOS).

HITSKöpfe

Geballte Computerpower gegen SARS-CoV-2

Die ersten Impfstoffe schüren die Hoffnung auf ein baldiges Ende der Pandemie, wirksame Medikamente gegen die Krankheit



lassen jedoch bisher auf sich warten. Nun haben sich Wissenschaftler und Wissenschaftlerinnen des europäischen Konsortiums EXSCALATE4CORONAVIRUS (E4C), des “Human Brain Project” und anderer europäischer Forschungsinstitute zusammengeschlossen, um wirksame Moleküle ausfindig zu machen, die die SARS-CoV-2-Hauptprotease hemmen – ein vielversprechendes Angriffsziel für antivirale Medikamente.

Um genauer zu verstehen, welche weiteren Faktoren die Form und Funktion des Enzyms beeinflussen, untersuchte **Rebecca Wade** (MCM) - gemeinsam mit einem Team aus dem Forschungszentrum Jülich (FZJ) sowie Forschenden des Stockholmer Royal Institute

of Technology (KTH) - mehr als 30.000 mögliche räumliche Anordnungen seiner dreidimensionalen Form. Dabei half den Forschenden das Analysewerkzeug TRAPP, das am HITS entwickelt wurde, die „Einzelschnappschüsse“ zu ordnen und die am besten passenden Strukturen zu finden, die dann von den Kolleg/-innen in Jülich gescreent wurden. „So haben wir berechnet, welche Moleküle theoretisch in diese möglichen Formationen hineinpassen könnten“, erklärt Giulia Rossetti (FZJ).

Gossen, J. et al.: A Blueprint for High Affinity SARS-CoV-2 Mpro Inhibitors from Activity-Based Compound Library Screening Guided by Analysis of Protein Dynamics. ACS Pharmacology & Translational Science Article ASAP DOI: 10.1021/acspstsc.0c00215

Licht und Schatten: Software auf dem Prüfstand

Digitale Werkzeuge sind in der Wissenschaft unerlässlich, besonders dann, wenn große Mengen an Forschungsdaten anfallen und schnell verarbeitet werden müssen. Entwicklung und Wartung wissenschaftlicher Software sind jedoch oft von Finanzierungsunsicherheit und Zeitdruck geprägt, was zu Qualitätsmängeln führen kann. Um die Softwarequalität automatisiert zu bewerten, haben **Alexandros Stamatakis** und **Dimitri Höhler** (CME) mit Kollegen am Karlsruher Institut für Technologie (KIT) das Tool „SoftWipe“ entworfen. Es bietet einen schnellen, zuverlässigen und kostengünstigen Lösungsansatz. Die Autoren haben in ihrer Studie bei 48 Programmen aus verschiedenen Forschungsbereichen bewertet, wie die Codierungsstandards eingehalten wurden. Die Qualitätsunterschiede waren teilweise gravierend. Die Autoren empfehlen deshalb, Tools wie „SoftWipe“ standardmäßig im Auswahl- und Begutachtungsprozess für wissenschaftliche Software einzusetzen.

Zapletal, A., Höhler, D., Sinz, C. et al.: The SoftWipe tool and benchmark for assessing coding standards adherence of scientific software. Sci Rep 11, 10015 (2021) <https://doi.org/10.1038/s41598-021-89495-8>

Forschung

Im Hintergrund: Die Universität Heidelberg



Im letzten Jahr wurden Teams vorgestellt, die das Leben für die Forscher/-innen am HITS „hinter den Kulissen“ angenehmer und schöner machen. Nun ist es an der Zeit, ein Gremium zu beleuchten, das

durch sein Wirken „im Hintergrund“ die Existenz des Instituts ermöglicht: die Gesellschafter des HITS. In dieser Ausgabe ist die Universität Heidelberg an der Reihe, mit ihrem Prorektor für Forschung **Jörg Pross**.

Herr Professor Pross, seit wann ist die Universität Heidelberg Gesellschafterin des HITS, und wie kam es dazu?

Die Universität Heidelberg ist seit November 2014 Gesellschafterin, mit einem Anteil von 15 Prozent. Unsere Zusammenarbeit mit der Vorgängerinstitution des HITS, der EML Research gGmbH, reicht jedoch schon ins Jahr 2007 zurück, als eine erste Vereinbarung

geschlossen wurde. Ein wichtiger Schritt war die gemeinsame Berufung des Astrophysikers Volker Springel 2009/2010. Seither ging die Entwicklung stetig weiter, und Stand heute sind das HITS und die Universität Heidelberg über vier Stiftungsprofessuren und zahlreiche weitere Aktivitäten miteinander verbunden.

Welches Interesse hat die Universität daran, mit dem HITS als Gesellschafterin auch formal verbunden zu sein?

Das HITS leistet einen wichtigen Beitrag dazu, den Wissenschaftsstandort Heidelberg noch sichtbarer und attraktiver zu machen. Gemeinsame Berufungen sind ein hervorragendes Werkzeug, um im immer härter werdenden Wettbewerb um die klügsten Köpfe Spitzenwissenschaftler/-innen davon zu überzeugen, nach Heidelberg zu kommen. Die daraus entstehenden Synergien haben sich für beide Seiten hervorragend bewährt.

Welche Vorteile erwachsen daraus Ihrer Ansicht nach für das HITS?

Generell profitiert das HITS von der Strahlkraft des Wissenschaftsstandorts Heidelberg, zu der es umgekehrt auch wieder selbst beiträgt - ein sich selbst verstärkender Prozess zum Nutzen aller Beteiligten. Konkret ermöglicht die enge Zusammenarbeit den HITS-For-

schenden einen Zugang zu den vielen Facetten der forschungsunterstützenden Infrastruktur der Universität, zum Beispiel zu den Angeboten der Graduiertenschulen. Viele HITS-Gruppenleiter/-innen sind zugleich Professor/-innen an der Universität. Durch ihre Einbindung in die universitäre Lehre haben sie direkten Kontakt zu Studierenden, von denen sie nicht wenige für eine Doktorarbeit begeistern können; die Promotion, die in der Regel ja nur von Universitäten gewährt werden kann, geschieht dann über die Ruperto Carola. HITS-Juniorgruppenleiter/-innen können sich über die Universität habilitieren und so ihre akademische Karriere entscheidend weiterentwickeln.

Was macht für Sie das HITS so spannend?

Mich beeindruckt enorm die wissenschaftsgeleitete Atmosphäre am HITS – das ist für mich akademische Freiheit im besten Sinne. Dem Stifter Klaus Tschira und seiner Vision gegenüber empfinde ich größten Respekt. Die Möglichkeit, mit einem absoluten Minimum an administrativen Erschwernissen forschen zu können, ist Privileg und Verantwortung zugleich. Sie macht das HITS zu einem einzigartigen Projekt.

Impressum | Dr. Peter Saueressig (Vi.S.d.P.), saueressig@h-its.org, Tel. +49 6221 533 245 | Bildnachweise: HITS, Gülay Keskin, Philip Benjamin | www.h-its.org

Im Hintergrund



The Charts