

Neue Fakultät an der Universität Heidelberg: HITS-Forschende „an Bord“

Mit dem Ziel, ihre technisch-ingenieurwissenschaftliche Expertise zu bündeln und ihr For-

schungs- und Fächerspektrum in einem sich dynamisch entwickelnden Kompetenzfeld auszubauen, hat die Universität Heidelberg eine neue Fakultät gegründet – die Fakultät für Ingenieurwissenschaften. Im Mittelpunkt stehen dabei nicht die traditionellen Technikwissenschaften, sondern innovative Engineering-Ansätze. Die Fakultät nahm im Oktober 2021 ihre Arbeit auf. Gründungsdekan ist Prof. Dr. Guido

Teil der neuen Fakultät werden auch die HITS-Gruppenleiter/-innen **Rebecca Wade** (Molecular and Cellular Modeling), **Frauke Gräter** (Molecular Biomechanics) und **Vincent Heuveline** (Data Mining and Uncertainty Quantification) sein. Sie bringen ihre langjährige Expertise in der Erforschung biomolekularer Systeme mittels Computer und in der Materialforschung sowie auf den Gebieten „Engineering Mathematics“ und Hochleistungsrechnen ein. Alle drei gehören ebenfalls dem IWR an, Rebecca Wade ist außerdem Mitglied des Zentrums für Molekulare Biologie der Universität Heidelberg (ZMBH) und im Direktorium des IWR. Die Fakultät für Ingenieurwissenschaften führt Technische Informatik, Engineering Molecular Systems und kohlenstoffbasierte Materialwissenschaften sowie Molekulare Biotechnologie zusammen. Diese profilgebenden Bereiche werden durch weitere Wissenschaftler aus fächerübergreifenden Forschungszentren der Universität – dem IWR, dem Zentrum für Molekulare Biologie, dem Biochemie-Zentrum und dem BioQuant-Zentrum – verstärkt.



Kanschat, der dem Direktorium des Interdisziplinären Zentrums für Wissenschaftliches Rechnen (IWR) angehört.

schungs- und Fächerspektrum in einem sich dynamisch entwickelnden Kompetenzfeld auszubauen, hat die Universität Heidelberg eine



Via Data

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

HITS

Auch in diesem Jahr: „Highly Cited Researcher“ am HITS

Zum sechsten Mal hintereinander zählt HITS-Gruppenleiter **Alexandros Stamatakis** (CME) zu den am häufigsten zitierten Forschenden weltweit. Dies ergab die Untersuchung „Highly Cited Researchers“ des US-Unternehmens „Clarivate Analytics“. Die Rangliste ist ein wichtiger Indikator für den Einfluss wissenschaftlicher Publikationen. Stamatakis ist im Ranking mit der Erstzugehörigkeit (Affiliation) zum HITS vertreten, in



der Zweitaffiliation gehört er dem Karlsruher Institut für Technologie (KIT) an. Er ist in der Kategorie „Cross-Field“ aufgeführt. Sie erfasst Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler, die über ihr Arbeitsgebiet hinaus überragenden Einfluss auf mehrere Forschungsfelder ausüben. Damit trägt das Ranking der zunehmend interdisziplinären Forschung Rechnung.

Computergestützte Forschung: Hilfe beim Kampf gegen Gehirnentzündungen durch COVID-19

HITS ist Partner im neuen EU-finanzierten Forschungsprogramm „BRAVE.“ Das Projekt soll dabei helfen, COVID-19-Gehirnentzündungen mit



Molekülen zu bekämpfen, die zuvor am Computer entwickelt wurden. Es wurde nach einer Ausschreibung im Rahmen des Human Brain Project (HBP) für eine Finanzierung durch die Europäische Kommission (EC) ausgewählt, um die Nutzung der HBP- und EBRAINS-Infrastruktur für die COVID-19-Forschung zu fördern. Koordinatorin des Projekts ist die Universität Turin (Italien), weitere Partner sind die Universität Pavia (Italien) das Forschungszentrum Jülich und die HITS-Forschungsgruppe Molecular and Cellular Modeling (MCM) unter der Leitung von **Rebecca Wade**.

Neue HITSters und Gäste

- Masterstudierende:** Vincent Bronner (SET); Marco Vetter, Freyja Walberg (beide PSO); Xinyi Zhang (CME)
- Promovierende:** Lynn Buchele, Quentin Coppée (beide TOS); Alexander Holas (PSO); Wei Liu (NLP); Stiv Llenga (CCC); Micaela Menegaldo (AIN); Anastasis Togkousidis (CME)
- Postdocs:** Eva Laplace (SET); Ghulam Qadir (CST)
- Verwaltung:** Yashasvini Balachandra (Controlling)
- Zu Gast am HITS:** Marcel Meyer, Universität Heidelberg (MBM); Melanie Schienle, KIT Karlsruhe (CST); Dandan Wei, CSC Scholarship, China (SET)

HITS Gruppen (12/2021): *Astroinformatics (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).*

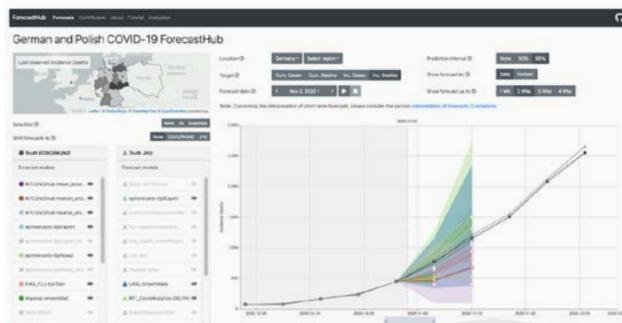
HITSKöpfe

Mehr als die Summe der einzelnen Teile: Kombination von Vorhersagemodellen verbessert COVID-19 Prognosen

Manchmal ergibt sich ein besseres Gesamtbild einer Situation, wenn unterschiedliche Ansätze kombiniert werden. Forschende des German-Polish COVID-19 Forecast Hub wählten diese Herangehensweise, um Stärken und Schwächen verschiedener COVID-19-Vorhersagemodelle herauszuarbeiten und daraus in Kombination sogenannte Ensemble-Vorhersagen zu bilden, die die Prognosen gegenüber Einzelmodellen verbessern. Die Studie wurde im Fachjournal „Nature Communications“ veröffentlicht und in die „Editors‘ Highlights“ von „Nature Communications“ aufgenommen.

„Unsere Vergleichsplattform und der regelmäßige Austausch zwischen den einzelnen Modellierungsteams hilft, nicht nur einzelne Modelle, sondern auch die kombinierte Gesamtvorhersage systematisch zu verbessern“, sagt **Melanie Schienle**, Professorin für Statistik und Ökonometrie am KIT und derzeit Gastwissenschaftlerin am HITS. Gemeinsam mit HITS-Gruppenleiter **Tilmann Gneiting** (CST) leitet sie das Projektteam. Der Forecast Hub verfolgt einen „Open-Science“-Ansatz: Er wertet Prognosen aus und sichert die gesamte Historie der Modellergebnisse. „Wenn man Modelle im Rückblick

anwendet, sehen sie oft etwas besser aus, als sie sind, und diesen Fallstrick wollten wir vermeiden“, fügt **Johannes Bracher** (HITS und KIT), der Erstautor der Studie, hinzu. „Wir haben die Regeln für den Vergleich im Voraus öffentlich festgelegt, ähnlich wie bei pharmazeutischen oder medizinischen Studien.“



Der Untersuchungszeitraum umfasst den Beginn der zweiten Welle in Deutschland und Polen vom 12. Oktober bis zum 19. Dezember 2020, der durch eine Verschärfung der nicht-pharmazeutischen Maßnahmen gekennzeichnet war. Sie führten zu einem Rückgang der Fälle in Polen und zu einem Plateau und einem erneuten Anstieg der Fälle in Deutschland. Dreizehn unabhängige Gruppen lieferten probabilistische Echtzeit-Vorhersagen von COVID-19-Fällen und Todesfällen für Vorlaufzeiten von einer bis vier

Wochen. Die Ensemble-Vorhersagen zeigten eine gute relative Performance und schnitten in der Regel ähnlich gut ab wie die besten Einzelmodell-Vorhersagen. Außerdem schwankte ihre Leistung in den verschiedenen Wochen weniger stark. „Wir sehen also eindeutig den Vorteil dieses kollaborativen Ansatzes“, sagt Johannes

Bracher. „Es ist wie bei dem berühmten Aristoteles-Zitat: ‚Das Ganze ist mehr als die Summe seiner Teile.‘“

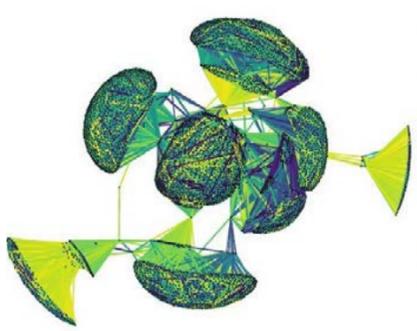
Die Auswertungen zeigen darüber hinaus, dass die Vorhersage von COVID-19 nach wie vor sehr schwierig ist. „Die Vorhersagen der unterschiedlichen Modelle waren sehr heterogen – sie stimmten oft nicht darin überein, was als nächstes passieren würde“, fügt Melanie Schienle hinzu. „Wenn wir jedoch die verschiedenen Vorhersagen zusammen betrachten, können wir den Grad der Unsicherheit realistischer einschätzen.“

Publikation: Bracher, J., Wolfram, D., Deuschel, J. et al. A pre-registered short-term forecasting study of COVID-19 in Germany and Poland during the second wave. Nat Commun 12, 5173 (2021). <https://doi.org/10.1038/s41467-021-25207-0>

Forschung

Beyond the limits: Das „HITS Lab“

Ein wesentliches Merkmal des HITS ist die Interdisziplinarität. Die Zusammenarbeit über Fächergrenzen hinweg ist jedoch eine große Herausforderung. Zwar wird am HITS bereits interdisziplinär gearbeitet, doch will sich das Institut intensiver dieser Herausforderung widmen. Ein Instrument zur Verbesserung der Zusammenarbeit ist das so genannte „HITS Lab“ - ein internes Programm für Projekte, bei denen mindestens zwei Gruppen des HITS aus verschiedenen Disziplinen zusammenkommen, um an einem gemeinsamen Thema zu arbeiten. Die beteiligten Gruppen können im Rahmen des „HITS Lab“ Forschende einstellen, die von den Gruppenleiter/-innen gemeinsam betreut werden. Bislang gab und gibt es vier „HITS Lab“-Projekte.



„Das HITS beheimatet so manchen wissenschaftlichen Leuchtturm“, sagt die wissenschaftliche Leiterin des HITS, **Frauke Gräter**. „Mit dem HITS Lab zielen wir darauf ab, neue Ansätze in den weiten Räumen zwischen diesen Leuchttürmen zu suchen und Brücken zwischen den Wissenschaftskulturen zu bauen.“

Das erste Projekt startete bereits Ende 2019, als Frauke Gräter (MBM) und **Michael Strube** (NLP) gemeinsam mit Vera Nünning (Anglistisches Seminar der Universität Heidelberg) im Rahmen eines Projekts am Marsilius-Kolleg der Universität der Frage nachgingen: „Beeinflusst die Qualität des Schreibens den wissenschaftlichen Impact?“ Ebenfalls Ende 2019 bekamen Michael Strube, **Wolfgang Müller** (SDBV) und Kolleg/-innen eine Förderung des BMBF für das Projekt „DeepCurate“, dessen wissenschaftliche Idee auch aus der HITS Lab-Initiative stammt.

Im Jahr 2020 begannen zwei weitere HITS Lab-Projekte: „Emulation in der Simulation“ ist eine Kooperation von Frauke Gräter, **Friedrich Röpke** (PSO) und **Tilmann Gneiting** (CST) mit dem Ziel, durch den geschickten Einsatz von Machine-Learning-Techniken - sogenannten Emulatoren - Teilergebnisse abzuschätzen und damit den Rechenaufwand zu reduzieren.

Ein anderes Projekt heißt „Geometry and Representation Learning“ und ist eine Kooperation von **Anna Wienhard** (GRG), Michael Strube (NLP) und ihren Gruppen. Es untersucht die Verwendung nicht-euklidischer Geometrien in der natürlichen Sprachverarbeitung. Das Projekt hat bereits Aufmerksamkeit in der Machine-Learning-Community erzielt. Zwei Studien wurden veröffentlicht und erfolgreich auf internationalen Machine Learning-Konferenzen (NeurIPS 2020, ICML 2021) vorgestellt. Eine dritte Veröffentlichung wurde kürzlich als „Spotlight-Paper“ auf der „NeurIPS“-Konferenz vom 7. bis 10. Dezember 2021 angenommen und zählt damit zu den drei Prozent der besonders herausragenden Studien auf der Konferenz.

Impressum | Dr. Peter Saueressig (V.i.S.d.P.), saueressig@h-its.org, Tel. +49 6221 533 245 | Bildnachweise: HITS, Annette Mück, Covid-19 Forecast Hub | www.h-its.org

Beyond the limits



The Charts