

## ERC Starting Grant für HITS-Gruppenleiterin

**Ganna Gryn'ova**, Leiterin der Gruppe „Computational Carbon Chemistry“ (CCC) am HITS, erhielt eine prestigeträchtige wissenschaftliche Aus-



zeichnung: Der Europäische Forschungsrat (ERC) hat ihr einen ERC Starting Grant in Höhe von rund 1,5 Millionen Euro für das Projekt „PATTERN-CHEM“ zugesprochen. Es zählt zu den knapp zehn Prozent der Projektvorschläge, die für eine Förderung ausgewählt wurden. „Wir freuen uns

sehr für Ganna und sind auch ein bisschen stolz auf diesen Erfolg, denn diese Grants spiegeln die hohe Qualität unserer Forschung wieder“, so Institutsprecherin Frauke Gräter. „Mittlerweile arbeiten Forschende in sechs von dreizehn Gruppen mit Mitteln eines ERC-Grants oder sind als Begünstigte an einem solchen beteiligt.“ Die aus der Ukraine stammende Ganna Gryn'ova promovierte 2014 in theoretischer Chemie an der Australian National University in Canberra. Danach arbeitete sie mit einem Postdoc-Stipendium an der École polytechnique fédérale de Lausanne, Schweiz. Seit April 2019 leitet sie die CCC-Forschungsgruppe am HITS. Neben anderen Auszeichnungen hat Ganna Gryn'ova ein Marie Skłodowska-Curie Actions Individual Fellowship der Europäischen Kommission erhalten (2016) und ist Mitglied im Elisabeth-Schiemann-Kolleg der Max-Planck-Gesellschaft (2021). Außerdem ist sie am Sonderforschungsbereich „SFB1249“ der Deutschen Forschungsgemeinschaft: N-Heteropolycyclen als Funktionsmaterialien“ beteiligt sowie Mitglied des Interdisziplinären Zentrums für Wissen-

schaftliches Rechnen (IWR) der Universität Heidelberg.

## Nutzung von Mustern in Funktionsmaterialien

Organische Funktionsmaterialien verfügen über unzählige chemische und physikalische Eigenschaften, die von Wert für die Umweltsanierung, die „grüne“ Katalyse, die Pharmakotherapie und vieles mehr sind. Die CCC-Gruppe nutzt neueste Methoden der computergestützten Chemie, um diese Materialien zu erforschen und weiterzuentwickeln. Bislang hat das Team die Grundlagen für die genaue und effiziente Simulation zweidimensionaler organischer Materialien und ihrer Wechselwirkungen mit kleinen molekularen Targets geschaffen. Darauf baut das neue, vom ERC geförderte Projekt „PATTERN-CHEM“ auf. Es wertet die topologischen Fingerabdrücke neuartiger, viel versprechender Materialien wie Graphen-Derivate, kovalente organische Gerüste und stark verzweigte Polymere aus. Letztlich soll diese Forschung neue Wege zur Entwicklung und Optimierung organischer Funktionsmaterialien für wissenschaftliche oder industrielle Anwendungen eröffnen.



## Via Data

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

## HITS

### HITS-Forscherin in Leitungsfunktion bei ELIXIR

ELIXIR, eine zwischenstaatliche Organisation, die biowissenschaftliche Ressourcen aus ganz Europa integriert, hat für mehrere ihrer Plattformen neue Führungskräfte benannt. Unter ihnen ist die HITS-Forscherin **Ulrike Wittig** aus der Gruppe Scientific Databases and Visualization (SDBV). Sie leitet seit Januar 2022 die Datenplattform, zusammen mit Patrick Ruch (Schweiz) und Silvio Tosatto (Italien). ELIXIR will den Wissenschaftler/-innen erleichtern, Daten zu finden und gemeinsam zu nutzen, Fachwissen auszutauschen und sich auf best-practice-Verfahren zu einigen.



Ulrike Wittig, Leiterin der Gruppe Scientific Databases and Visualization (SDBV) bei ELIXIR, leitet seit Januar 2022 die Datenplattform, zusammen mit Patrick Ruch (Schweiz) und Silvio Tosatto (Italien).

### HITS-Gruppenleiter Teammitglied am International Space Science Institute

AIN-Gruppenleiter **Kai Polsterer** wurde als Mitglied eines internationalen Teams am International Space Science Institute (ISSI) ausgewählt. Das Team setzt sich aus Expert/-innen für Sternentstehung, Durchmusterungsdaten, Big-Data-Analyse und maschinelles Lernen zusammen, um aus Daten verschiedener Wellenlängen ein neues Evolutionsschema für die Entwicklung junger Sterne abzuleiten. Im ISSI kooperieren Forschende aus der ganzen Welt in einem multi- und interdisziplinären Rahmen, um neue wissenschaftliche Horizonte zu erschließen.



### Neue Position: „Acting group leader“ in der MBM-Gruppe



Seit diesem Jahr gibt es eine neue Position am HITS: den „Acting Group Leader.“ Er oder sie soll den oder die Institutsprecher/-in entlasten und die jeweilige Forschungsgruppe stellvertretend leiten. Der erste „Acting Group Leader“ ist **Camilo Aponte-Santamaria** aus der MBM-Gruppe, die unter der Leitung der derzeitigen Institutsprecherin **Frauke Gräter** steht.

## Neue HITSters und Gäste

### Masterstudierende:

### Promovierende:

### Wissenschaftliche Mitarbeitende und Postdocs:

### Zu Gast am HITS:

Evgeni Ulanov (HITS Lab, CST & MBM)

Jonathan Teuffel, Aysecan Ünal (beide MBM)

Michael Bazot (TOS); Susan Eckerle (SDBV); Antony Noll (TOS)

Matheus Vitor Ferreira Ferraz (MCM)

**HITS Gruppen (03/2022):** *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

### Digitale Werkzeuge für effektive Viren-Forschung

Die Vielfalt der Viren auf unserem Planeten ist sprichwörtlich unfassbar, denn die Wissenschaft kennt bislang nur einen Bruchteil der existierenden Viren. Welch verheerende Folgen neu auftretende Viruserkrankungen für die Menschheit haben, hat die derzeitige SARS-CoV2-Pandemie gezeigt. Daher ist es wichtig, die Diversität der global vorkommenden Viren mit Mitteln der Informatik zu katalogisieren und für die Wissenschaft nutzbar zu machen. Öffentliche Sequenzdatenbanken sind zu einem riesigen Speicher für genetische Daten geworden, den Forschende aus aller Welt befüllen. Diese Daten stammen von biologischen Forschungsgruppen, die Sequenzdaten erzeugen, sei es zur Untersuchung des Bodenmikrobioms des Amazonas-Regenwaldes oder zur Erforschung der Ausbreitung von Krankheiten wie dem SARS-CoV-

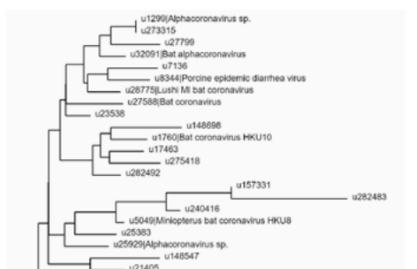
2-Virus. In der Regel werden bei solchen Studien genetische Sequenzdaten nicht nur von dem Organismus gewonnen, der untersucht werden sollte, sondern auch von anderen Organismen, deren DNA zufällig in der Probe enthalten ist. Solche zufälligen Daten können für andere Forschende besonders interessant sein. Diesen verborgenen Schatz zu heben bedeutet, dass die Forschenden in ungeheurer großen und verteilten Datenmengen suchen müssten. Denn in den frei zugänglichen öffentlichen Datenbanken liegen Sequenzdaten in der Größenordnung von Petabytes (d.h. Millionen von Gigabytes). Die Forschenden im internationalen Serratus-Projekt haben hierfür „Serratus“ entwickelt, eine open source Cloud-Computing-Infrastruktur, die den Sequenzabgleich im Petabyte-Maßstab ermöglicht.



Mit den entwickelten Werkzeugen konnten die Forscher über 130.000 neue RNA-Viren identifizieren, was eine Verzehnfachung der bekannten Virenspezies bedeutet. Darunter befanden sich bisher unbekannte Mitglieder der Coronavirus-Familie, die eng mit dem SARS-CoV-2-Virus verwandt sind, sowie neuartige Viren, die mit dem Hepatitis-D-Virus verwandt sind, und neuartige Bakteriophagen, d. h. Viren, die speziell gegen Bakterien gerichtet sind.

Die Ergebnisse des internationalen Forschungsteams wurden jetzt im Fachjournal „Nature“ veröffentlicht. Die Daten aus dem Projekt sind öffentlich zugänglich und finden sich auch auf der Website [www.serratus.io](http://www.serratus.io).

Edgar, R.C., Taylor, J., Lin, V. et al. Petabase-scale sequence alignment catalyses viral discovery. *Nature*, 26 January 2022. DOI: 10.1038/s41586-021-04332-2 / <https://www.nature.com/articles/s41586-021-04332-2>



### Zahl der neu entdeckten Viren verzehnfacht

„Unsere Infrastruktur ermöglicht eine effiziente Suche im Sequence Read Archive, einem der beliebtesten öffentlichen Sequenzspeicher“, erläutert **Pierre Barbera**, der als Mitglied der HITS-Forschungsgruppe „Computational Molecular Evolution“ Ko-Autor der Studie war. Er erstellte Software zur Berechnung und Analyse der phylogenetischen Stammbäume aller untersuchten Spezies.

## Forschung

### Beyond the limits: SIMPLAIX

Die Erforschung molekularer Mechanismen und das rationale Design von Molekülen und Materialien für gezielte Anwendungen beruht traditionell auf physikalisch basierten Modellierungen und Simulationen. Obwohl dies die moderne Wissenschaft und Technologie bereits revolutioniert hat, besteht jedoch nach wie vor die Notwendigkeit, den unendlich komplexen dreidimensionalen Struktur-Eigenchafts-Raum molekularer Systeme skalenübergreifend abzubilden, zu erforschen und zu analysieren. Hier bieten datengesteuerte und maschinelle Lernmethoden einen vielversprechenden Ansatz. Doch dazu müssen die größten Hindernisse bei der Anwendung datengesteuerter Methoden auf atomistische Systeme – die Behandlung komplexer dreidimensionaler Strukturen und die Integration in Multiskalen-Simulationsalgorithmen, um nur einige zu nennen – erst überwunden werden. SIMPLAIX ist eine neue interinstitutionelle Dreier-Kooperation zwischen dem

HITS, der Universität Heidelberg und dem Karlsruher Institut für Technologie (KIT). Sie zielt darauf ab, die Expertise der drei Partnerinstitutionen zu bündeln, um die Herausforderungen bei der Überbrückung der Skalen von Molekülen hin zu molekularen Materialien durch Multiskalensimulation und maschinelles Lernen anzugehen.

In SIMPLAIX werden diese Methoden entwickelt, um damit in acht multidisziplinären, interinstitutionellen Forschungsprojekten anspruchsvolle Probleme bei der Erforschung von Biomolekülen und molekularen Materialien zu untersuchen, wie z.B. den Zusammenhang zwischen kollagenbedingten Krankheiten und dem Schutz vor Schäden durch Radikale. In weiteren Projekten geht es um die Anwendung maschinellen Lernens für unterstützte organische Elektronikmaterialien, die Beschleunigung klassischer Simulationen oder quantenchemischer Berechnungen durch maschinelles Lernen und die Erstellung von Prognosen, an welchen Stellen anorganische und organische Materialien unter Kraftereinwirkung reißen.

SIMPLAIX wird von den HITS-Forscherinnen **Rebecca Wade** und **Frauke Gräter** koordiniert, **Ganna Gryn'ova** ist eine der „Principal Investigators“. Die Initiative startete im Oktober 2021. Sie wird von der Klaus Tschira Stiftung finanziert und durch Sachleistungen des KIT und der Universität Heidelberg unterstützt. Im Laufe der Initiative werden 8 junge Forschende für die Projekte eingestellt. Einige Stellen sind bereits besetzt. Die offizielle SIMPLAIX-Eröffnungsveranstaltung findet am 12. April 2022 im Studio Villa Bosch, Heidelberg, statt.

### Wofür steht SIMPLAIX?

Ein „Simplex“ spiegelt die auf Mathematik basierende trilaterale Zusammenarbeit der drei beteiligten Institutionen wider.

- **SIM** steht für SIMulation
- **AI** steht für Künstliche Intelligenz (Artificial Intelligence)
- **X** steht für den interdisziplinären Austausch (Crossover) zwischen Simulation, KI, Molekülen und Materialien.
- Und so spricht man SIMPLAIX aus: /stm.pleɪks/ (IPA)

Impressum | Dr. Peter Saueressig (Vi.S.d.P.), [saueressig@hits.org](mailto:saueressig@hits.org), Tel. +49 6221 533 245 | Bildnachweise: HITS, Annette Mück, Gülay Keskin, Serratus Project, L.M.F. Junco (UNIANDES) | [www.hits.org](http://www.hits.org)

## Beyond the limits



# The Charts