

SIMPLAIX-Workshop: Maschinelles Lernen für die multiskalare Molekularforschung



Molekulare Mechanismen und das Design von Molekülen und Materialien für gezielte Anwendungen werden traditionell mit physikalisch basierten

Modellierungen und Simulationen erforscht. Diese haben die moderne Wissenschaft und Technologie revolutioniert. Die Wissenschaft kommt jedoch an ihre Grenzen, wenn sie die unendlich komplexen und variablen Strukturen und Eigenschaften molekularer Systeme auf unterschiedlichen Skalen, also vom Nano- bis zum Mikrometerbereich, abbilden, erforschen und analysieren will. Hier bieten datengesteuerte und maschinelle Lernmethoden einen vielversprechenden Ansatz. Deshalb haben das HITS, die Universität Heidelberg und das Karlsruher Institut für Technologie (KIT) im Herbst 2021 die Kooperation „SIMPLAIX“ ins Leben gerufen. Sie wollen die Expertise der

drei Partnerinstitutionen bündeln, um die Herausforderungen bei der Überbrückung der Skalen bei der Simulation von Biomolekülen und molekularen Materialien durch Multiskalensimulation und maschinelles Lernen anzugehen. SIMPLAIX wird von den HITS-Forscherinnen **Rebecca Wade** und **Frauke Gräter** koordiniert. Die Kooperation wird von der Klaus Tschira Stiftung ermöglicht und von den drei beteiligten Institutionen unterstützt. Inzwischen wurden junge Forschende für die 8 SIMPLAIX-Projekte eingestellt, es fanden 7 interne Projekttreffen in Heidelberg und Karlsruhe statt, und es gab einige gemeinsame HITS-SIMPLAIX-Kolloquien zu Themen wie neuronale Netze in der computergestützten Chemie oder Modellierung auf der atomaren Skala. „SIMPLAIX ermöglicht es uns, in interdisziplinären, interinstitutionellen Forschungsprojekten zusammenzuarbeiten“, sagt SIMPLAIX-Sprecherin Rebecca Wade. „Durch die Kombination von maschinellem Lernen und Simulationsansätzen erwarten wir neue Erkenntnisse bei skalenübergreifenden molekularen Phänomenen in komplexen Biomolekülen und molekularen Materialien.“



Diese Erkenntnisse werden letztlich zu neuen Ansätzen für das molekulare Design führen.“ Der nächste Schritt auf dem Weg zu neuen Ansätzen ist ein internationaler Workshop zum Thema Maschinelles Lernen für die molekulare Modellierung auf verschiedenen Skalen. Er wird vom 2. bis 4. Mai 2023 am Tagungsort des HITS, dem Studio Villa Bosc in Heidelberg, stattfinden. In diesem Workshop tauschen Expert*innen ihre Forschungsergebnisse aus und diskutieren über aktuelle Herausforderungen. 14 hochkarätige Referent*innen aus Europa, Asien und Nordamerika decken ein breites Spektrum an Themen ab. Der Workshop legt den Schwerpunkt auf informelle Präsentationen und Diskussionen und auf die Interaktion zwischen erfahrenen und jungen Forschenden.



Via Data

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

HITS

HITS-Köpfe gewinnen Wettbewerb mit „Habitable“

Wie kann man Forschung für alle zugänglich und erlebbar machen? Dieser Frage stellten sich Forschende im Hochschulwettbewerb von „Wissenschaft im Dialog“ zum Wissenschaftsjahr „Unser Universum.“ Aus über 70 Einreichungen zeichnete die Jury die besten 15 Kommunikationsideen zum Thema Weltall aus, darunter die der HITS-Köpfe **Vincent Bronner, Rajika Kuruwita, Eva Laplace, Duresa Temaj, Dandan Wei, Julian Saling** (alle SET) und **Jan Henneco** (SET/TOS): Ein Brettspiel namens „Habitable“, das die Astro-



nomie mit der Klimakrise verbindet, indem es die Spielenden motiviert, einen bewohnbaren Planeten zu erschaffen, auf dem trotz veränderter Bedingungen Leben möglich ist.

„Wir lieben Brettspiele“, sagt Eva Laplace. „Unser Ziel ist es, dass Familien und Freundeskreise ein spannendes Spiel genießen können, das sie dazu anregt, über den Klimawandel und die Auswirkungen menschlichen Handelns auf die Bewohnbarkeit unseres Planeten nachzudenken.“ Für die Umsetzung des Spiels erhalten die HITS-Wissenschaftler*innen Mittel in Höhe von 10.000 Euro.

Neue HITSters und Gäste

Senior Researcher:
Postdoc:
Wissenschaftliche Mitarbeitende:
Promovierende:

Melanie Schienle (CST)
Debora Monego (MBM), Sebastian Trujillo Gomez (AIN)
Alexandra Kozyreva (PSO), Gerhard Mayer (SDBV)
Tommaso Bartoloni (MCM), Mislav Brajkovic (MCM), Alessandro Calzolari (CCC),
Dominique Ostermayer (CCC, HITS Lab)
Angeliki Papadopoulou, Hellenic Republic University of Crete
Ida Bahmann
Harald Haas (Controlling)

HITS Gruppen (03/2023): *Astroinformatics (AIN), Computational Carbon Chemistry (CCC), Computational Molecular Evolution (CME), Computational Statistics (CST), Data Mining and Uncertainty Quantification (DMQ), Groups and Geometry (GRG), Machine Learning and Artificial Intelligence (MLI), 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

Auf der Welle der Forschungsdaten surfen

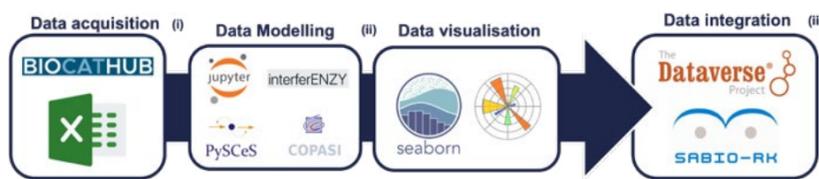


Während in der Forschung weltweit immer mehr Daten generiert werden, sind diese Datenmengen durch die derzeitige Praxis der Vermittlung wissenschaftlicher Ergebnisse kaum noch zu bewältigen. Fehlende Standards, unvollständige Metadaten und fehlende Originaldaten machen es fast unmöglich, publizierte Ergebnisse zu reproduzieren. Dies gilt auch für Studien zur katalytischen Aktivität, Selektivität und Stabilität von Enzymen und enzymatischen Netzwerken, einem Forschungsfeld, das für die industrielle Biotechnologie ebenso von großer Bedeutung ist wie für biomedizinische Fragestellungen. Hinzu kommt, dass Daten zur Beschreibung enzymatischer Experimente besonders komplex sind: Eine enzymatische Reaktion hängt von zahlreichen Faktoren ab, etwa der Proteinsequenz des Enzyms oder dem pH-Wert. Hoffnung macht nun das neuartige, standardisierte Datenaustauschformat „EnzymeML“, das 23 Autoren und Autorinnen aus 14 verschiedenen

Forschungseinrichtungen im Fachjournal *Nature Methods* vorstellen. EnzymeML kann die Ergebnisse eines enzymatischen Experiments komplett erfassen, von den Reaktionsbedingungen über die gemessenen Daten bis zu dem zur Analyse experimenteller Daten verwendeten kinetischen Modell und den geschätzten kinetischen Parametern. Das Format bietet einen nahtlosen Kommunikationskanal zwischen experimentellen Plattformen, elektronischen Laborbüchern, Werkzeugen zur Modellierung der Enzymkinetik, Veröffentlichungsplattformen und enzymatischen Reaktionsdatenbanken.

Die HITS-Wissenschaftler*innen **Ulrike Wittig** und **Andreas Weidemann** sind im Rahmen von EnzymeML für die Datenintegration zuständig. In der am HITS entwickelten Reaktionsdatenbank „SABIO-RK“ werden die kinetischen Daten nach der Modellierung direkt gespeichert. Ziel ist es, den gesamten Prozess der Datenverarbeitung vom Experiment im Labor bis zur Speicherung in Datenbanken mit EnzymeML zu unterstützen und damit auch die Vollständigkeit der Daten und deren Qualität von Anfang bis Ende zu gewährleisten.

Simone Lauterbach, et al.: *EnzymeML: seamless data flow and modeling of enzymatic data*, *Nature Methods* 2023, DOI 10.1038/s41592-022-01763-1; <https://www.nature.com/articles/s41592-022-01763-1>



Forschung

Beyond the limits: Sarbani Basu, Klaus Tschira Gastprofessorin



„Ich fühle mich fast wieder wie in meiner Postdoc-Zeit“, sagt **Sarbani Basu**, während sie am Schreibtisch ihres Büros mit Blick auf den Garten sitzt. „Das ist ein fantastisches Programm.“ Die Astrophysikerin und ehemalige Leiterin des Fachbereichs Astronomie an der Yale University, Connecticut (USA), ist die zweite Klaus Tschira-Gastprofessorin und war von Mitte September bis Ende November 2022 zu Gast am Institut.

Das Klaus-Tschira-Gastprofessorenprogramm will den internationalen Austausch und die wissenschaftliche Zusammenarbeit am HITS fördern. International renommierte Forschende werden für ein Sabbatical oder einen längeren Forschungsaufenthalt eingeladen. Sie arbeiten mit Wissenschaftler*innen am HITS zusammen, entwickeln gemeinsame Forschungsprojekte und engagieren sich am Institut und in der Wissenschaftsszene in der Region Heidelberg. Im Jahr 2023 wird das HITS zwei weitere Gastprofessuren ermöglichen.

Sarbani Basu nutzte ihren Aufenthalt vor allem, um mit der Forschungsgruppe „Theory and Observations of Stars“ (TOS) von **Saskia Hekker** zusammenzuarbeiten. „Ich kenne Saskia schon lange und begann die Kooperation mit ihr, als sie noch Postdoc in Birmingham war“, erinnert sie sich. „Hier am HITS arbeite ich mit ihr und ihrer Gruppe an einem langjährigen Projekt über die innere Struktur von Sternen. Ich hoffe, dass wir in einem Jahr einige Ergebnisse veröffentlichen können.“ Außerdem arbeitet sie mit dem TOS-Postdoc **Felix Ahlborn** an den Rotationen im Inneren der Sterne. „Dazu wird er die von mir entwickelte und von ihm weiterentwi-

ckelte Inversionstechnik nutzen, um diese Rotationen zu untersuchen“, erklärt sie.

Während ihres Aufenthalts hielt sie Anfang Oktober einen Vortrag im HITS-Kolloquium über die Physik der Sonne und war zu weiteren Vorlesungen in Heidelberg sowie bei der gemeinsamen Kolloquiumsreihe des Max-Planck-Instituts für Astrophysik (MPA), des Max-Planck-Instituts für extraterrestrische Physik (MPE) und der Europäischen Südsternwarte (ESO) in Garching eingeladen. Sie genoss auch die Möglichkeit, mit Forschenden anderer wissenschaftlicher Disziplinen am Institut ins Gespräch zu kommen, zum Beispiel in der HITS-Cafébar oder auf ihrer täglichen Fahrt mit dem „Science Bus“, der den HITS-Campus mit der Stadt verbindet.

Im Laufe ihres Stipendiums gewann die Zusammenarbeit mit Saskia Hekker an Schwung. „Wir setzen sie aus der Ferne fort, wenn ich wieder in den USA bin“, sagt Sarbani Basu. „Nachdem ich sechs Jahre lang das Astronomie-Department in Yale geleitet habe, hat mir die Zeit hier geholfen, wieder über Wissenschaft nachzudenken.“ Und sie fügt hinzu: „Dieses Programm ist eine großartige Gelegenheit, sich einfach hinzusetzen und nur auf die Wissenschaft zu konzentrieren.“

Impressum | Dr. Peter Saueressig (Vi.S.d.P.), saueressig@hits.org, Tel. +49 6221 533 245 | Bildnachweise: HITS, EnzymeML | www.hits.org

Beyond the limits



The Charts