Neuer HITS Journalist in Residence: Jackson Ryan

Der preisgekrönte australische Wissenschaftsjournalist **Jackson Ryan** ist der 13. „Journalist in Residence“ am HITS. Er begann seinen Aufenthalt im April 2025 und wird bis Oktober bleiben.

Eureka-Preis für Wissenschaftsjournalismus ausgezeichnet. Derzeit ist er Präsident der „Science Journalists Association of Australia“ und arbeitet als freier Journalist unter anderem für die New York Times, The Guardian, The Saturday Paper, The Monthly und Nature.

Während seiner Zeit am HITS will Ryan sich auf ein Thema konzentrieren: wissenschaftliche Integrität und öffentliches Vertrauen in die Wissenschaft. Sein Ziel ist es, eine Reihe von Artikeln zu schreiben, die sich an die breite Öffentlichkeit, die akademische Welt und an Wissenschaftsjournalist*innen richten.

Er beabsichtigt dabei, die zunehmend komplexe Beziehung der Gesellschaft zur Wissenschaft zu untersuchen. Sein besonderes Interesse gilt der Zuverlässigkeit großer Datensätze. Er möchte von deutschen Forschenden lernen, wie sie mit wissenschaftlichem Fehlverhalten umgehen.

Neben seinem eigenen Projekt freut sich Ryan darauf, mit deutschen und anderen europäischen Wissenschaftsjournalist*innen in Kontakt zu treten, und die internationalen Beziehungen zu stärken. Er hielt im Mai bereits einen Vortrag an der Universität Heidelberg zum Thema „Science, Fiction: Uncovering Research Misconduct Without Eroding Trust“ (Wissenschaft und Fiktion: Fehlverhalten aufdecken, ohne das Vertrauen in die Wissenschaft zu gefährden) und wird später in diesem Jahr einen weiteren öffentlichen Vortrag halten.

Via Data

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

HITS

Geschüttelt und gerührt: Erstes „Martini User Meeting“

Das Main-Neckar Martini User Meeting 2025 fand am 13. und 14. Februar im Studio Villa Bosch in Heidelberg statt und brachte über 40 Forschende aus der Region zusammen. Sie diskutierten über das Martini Coarse-Grained Kraftfeld, eine weit verbreitete Simulationsmethode in der Biomolekular- und Soft-Matter-Physik.

Die Veranstaltung umfasste Fachvorträge, eine Poster Session und eine Podiumsdiskussion über die jüngsten Entwicklungen und Anwendungen des Kraftfeldes, das von der „Martini Force-Field“ Initiative, einer internationalen Zusammenarbeit von Forscher*innen, entwickelt und gepflegt wird.

Fabian Grünewald, Independent Postdoc am HITS, organisierte die Veranstaltung zusammen mit Sebastian Thallmair (Frankfurt Institute for Advanced Studies - FIAS). Grünewald studierte Chemie an der Universität Groningen in den Niederlanden, wo er auch mit Auszeichnung in physikalischer/computer-

gestützter Chemie promovierte. Er kam im Oktober 2023 ans HITS und arbeitet seitdem eng mit den Gruppen MBM und MLI zusammen. Er entwickelt molekulare

Simulationsmethoden, um RNA-Nanopartikel zu entwerfen und zu optimieren, wobei er sich auf deren Struktur konzentriert und die Eigen- und Stabilität für Anwendungen in der Nanomedizin anstrebt.

Neue HITSters und Gäste

Masterstudierende: Gregory Jung (TOS), Arkaprabha Roy (PSO), Pranavandhan Upendranath (SET)
Zu Gast am HITS: Raphael Hirschi (Klaus Tschira Guest Professor, Keele University, UK), Maximilian Ludwig (DMQ), Constanza Vasquez Venegas (AIN)
Communications: Helena Camilleri (Team Assistance)
HITS Journalist in Residence: Jackson Ryan (Australia)

HITS Gruppen (06/2025): Astroinformatics (AIN), Computational Molecular Evolution (CME), Computational Statistics (CST), Data Mining and Uncertainty Quantification (DMQ), 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

Stammbaum der Bakterien: Am Anfang war der Sauerstoff

Die Forschung stand lange Zeit vor großen Herausforderungen, um die frühe Evolution des mikrobiellen Lebens zu verstehen – die Daten zu Fossilien waren lückenhaft, und es fehlte an einem zuverlässigen Altersmarker für die wichtigsten Bakteriengruppen. Ein internationales Forscherteam zeichnete jetzt in einer Studie die Entwicklung der bakteriellen Biosphäre der Erde über die letzten 4 Milliarden Jahre nach. **Benoit Morel**, ehemaliges Mitglied der Gruppe Computational Molecular Evolution (CME), spielte eine entscheidende Rolle bei der Identifizierung der Zeitachse der wichtigsten mikrobiellen Meilensteine. Die Arbeit wurde jetzt in „Science“ veröffentlicht.

Eine besondere Herausforderung war die Festlegung der maximalen Altersgrenze bzw. der Schätzungen für das frühestmögliche Auftreten von bakteriellen Abstammungslinien. Das Team nutzte jedoch das geochemische Archiv der Erde, in denen Hinweise des mikrobiellen Stoffwechsels enthalten sind, als ergänzende historische Quelle.

Integrative Ansätze zur Datierung der frühen bakteriellen Evolution

Einer der wichtigsten Momente in der biologischen Geschichte der Erde war die Große Sauerstoffkatastrophe, bekannt als „Great Oxidation Event“ (GOE), die sich vor etwa 2,4 Milliarden Jahren ereignete. Während dieser Zeit stieg der Sauerstoffgehalt in der Atmosphäre stark an, insbesondere weil Cyanobakterien die Fähigkeit entwickelten, durch Photosynthese Sauerstoff zu produzieren. Diese bedeutende Veränderung hatte große Auswirkungen, da sich viele Organismen an das Leben mit Sauerstoff anpassen mussten. Unter der Leitung von Forschenden der Eötvös Loránd Universität in Budapest nutzte das Team den Zeitpunkt dieser atmosphärischen Veränderung, um den bakteriellen Stammbaum zu kalibrieren. Dabei konzentrierten sie sich darauf, wann der aerobe Stoffwechsel erstmals auftrat. Am HITS entwickelte Benoit Morel eine Software, mit der sich horizontale Gentransfers zwischen den Vorfahren der Arten ableiten und der Zeitpunkt

dieser Transfers abschätzen lässt – ein Schlüssel zum Verständnis der Entstehung und Entwicklung bestimmter mikrobieller Eigenschaften. Die mit seinen Werkzeugen durchgeführten Analysen trugen maßgeblich dazu bei, den Zeitstrahl der Evolution zu verankern, den die Autor*innen der Studie vorschlagen.

Aerobe Bakterien existierten lange vor dem GOE

Eine der bemerkenswertesten Entdeckungen des Teams ist, dass die frühesten aeroben Bakterien fast 900 Millionen Jahre vor der Großen Sauerstoffkatastrophe, während des archaischen Äons, auftraten. Diese Entdeckung verändert unser Verständnis der mikrobiellen Evolution und der Geschichte der Sauerstoffversorgung der Erde. Die Ergebnisse dieser Studie geben nicht nur Aufschluss über die ferne Vergangenheit der aeroben Bakterien, sondern bieten auch eine vielversprechende neue Möglichkeit, die Entwicklung mikrobieller Merkmale im Zusammenhang mit dem geochemischen Archiv der Erde zu verfolgen – ein wichtiger Ansatz für die zukünftige Erforschung der frühen Evolution des Lebens.

Davin, A., Woodcroft, B., Soo, R., Morel, Murali, R., Schrempf, D., Clark, J., Álvarez-Carretero, S., Boussau, B., Moody, E., Szántho, L., Richy, E., Pisani, D., Hemp, J., Fischer, W., Donoghue, P., Spang, A., Hugenholtz, P., Williams, T., Szöllösi, G.: A geological timescale for bacterial evolution and oxygen adaptation. In: *Science*, 4 Apr 2025, Vol 388, Issue 6742. DOI: 10.1126/science.adp185

Forschung

Beyond the limits – Lu Yang, HITS Gastwissenschaftlerin

Lu Yang, Professorin an der University of Minnesota, USA, war seit Februar 2025 Gastwissenschaftlerin in der Computational Statistics (CST) Gruppe. Während ihres dreimonatigen Aufenthalts am HITS erlebte sie die Interdisziplinarität des Instituts aus erster Hand. Im Interview für die HITS-Social-Media-Kanäle erklärt sie, wie die statistische Methodik die Entscheidungsfindung in der Praxis beeinflusst. Sie berichtet über die wichtigsten Erkenntnisse, die sie während ihrer Zeit am Institut gewonnen hat, und gibt einen Ausblick auf die spannenden Herausforderungen, die sie als nächstes angehen will.

Statistische Methodik kann für Außenstehende oft abstrakt erscheinen. Können Sie ein Beispiel dafür nennen, wie Ihre Arbeit Entscheidungen oder Innovationen in der Praxis beeinflussen kann?

Meine Forschung im Bereich Statistik ist weitgehend durch Anwendungen im Versicherungswesen begründet. In einer meiner jüngsten Arbeiten haben wir beispielsweise eine Methode entwickelt, um die Schadenreserve für Versicherungsunternehmen anhand von Mikrodaten zu ermit-

teln. Das ist möglich, weil in den letzten Jahren immer mehr detaillierte Daten zur Verfügung gestellt wurden.

Welche aktuellen Entwicklungen in der Statistik oder Datenwissenschaft finden Sie besonders spannend – oder gar beunruhigend – und warum?

Natürlich die explosionsartige Entwicklung der Künstlichen Intelligenz. Statistik und Datenwissenschaft sind das Rückgrat der KI. Sie bietet einerseits zahlreiche Möglichkeiten, andererseits bringt sie viele Herausforderungen und Probleme mit sich, wenn es um die effektive und verantwortungsvolle Nutzung der Systeme geht.

Wenn Sie auf Ihre Zeit als Gastwissenschaftlerin am HITS zurückblicken, was hat Sie besonders überrascht oder inspiriert – auf wissenschaftlicher oder persönlicher Ebene?

Ich war erstaunt, wie kollegial das Umfeld am

HITS ist. Ich habe nicht erwartet, dass ich als Gastwissenschaftlerin so viele Gelegenheiten zum Austausch mit anderen Wissenschaftler*innen und Kolleg*innen haben würde.

Welche Herausforderungen und großen Fragen der statistischen Methodik wollen Sie als nächstes angehen?

Ich habe von der CST-Gruppe viel über die Kalibrierung von Vorhersagen gelernt, was meiner Meinung nach ein wichtiges und interessantes Gebiet der Statistik ist. Ich möchte diese Methoden anwenden, um Modelle für verschiedene Datentypen zu bewerten und zu verfeinern. Außerdem möchte ich auch durch die Entwicklung von Verfahren zu diesem Bereich beitragen.

Wie haben Sie Ihre Freizeit während Ihres Aufenthalts in Heidelberg verbracht?

Ich habe einen Deutschkurs belegt, der vom HITS angeboten wird, und habe einige Konzerte besucht. Außerdem habe ich die gute geographische Lage Heidelbergs genutzt und bin viel durch Europa gereist. Ich war z. B. in Amsterdam, Löwen, Österreich und Spanien. Das hat sehr viel Spaß gemacht.

Beyond the limits

The Charts