

New Research Group “Computational Statistics”



In November, the new research group Computational Statistics has started its work. The mathematician **Prof. Tilmann Gneiting** is group leader and has simultaneously been appointed as professor at the Karlsruhe Institute of Technology (KIT). Gneiting deals with spatial statistics, and especially with the theory and practice of forecasts. At HITS, he wants to further develop the mathematical foundations of such forecasts. One of his collaborators is the German Weather Service.

New junior group “Astro Informatics”

On September 1, the new **Astro Informatics (AIN)** junior research group has started its work at HITS. The leader of the newly established group is **Dr. Kai Polsterer**, who came to Heidelberg from the University of Bochum. The group develops new approaches to analyze and process the growing amount of data in astronomy.



“The new group Computational Statistics is an important element of the HITS concept because mathematical methods are essential for making sense of these big data mountains.”

Dr. h.c. Dr. E.h. Klaus Tschira, HITS founder

HITS

Rebecca Wade associate editor for scientific journal



Rebecca Wade, leader of the **MCM** group, has been appointed as an associate editor for the journal PLOS Computational Biology.

PLOS Computational Biology aims at publishing outstanding primary research articles on all aspects of computational biology applied to different and integrated biological scales, from molecules and cells to patient populations and ecosystems.

With this appointment, Rebecca Wade continues her longtime activity as an editor for several scientific journals, such as BMC Biophysics, Journal of Molecular Recognition and Protein Engineering.

New Visiting Scientists

In September 2013, HITS welcomed the following visiting scientists: **Katra Kolšek** started to work in the MBM group and **Paschalia Kapli** in the SCO group. In October, the DAAD scholar **Prajwal Nandekar** joined the MCM group as visiting scientist. **Dominik Steinhauser** began his work in the TAP group in November.

New Staff Members

In October, the doctoral scholar **Alex Judea** joined the NLP group and **Sven Dennis Kügler** the AIN group. The TAP group welcomed **Jolanta Krzyszkowska** as a master student. In November, **Isabel Hartmann** joined HITS as Public Relations Assistant.

HITSTERS

Biological Diffusion and Brownian Dynamics Brainstorm 3



In continuation of the previous two BDBDB meetings, BDBDB3 provided a forum for intensive discussions about the state-of-the-art in Brownian Dynamics simulations of biological macromolecules and related methodologies. The topics covered included measurements of macromolecular diffusion, calculation of binding rate constants, membrane diffusion and protein association, nano-particles and surface-protein interactions, macromolecular crowding and confinement, hydrodynamic interactions, macromolecular dynamics and flexibility, and approaches to multi-scale simulation. From October 7-9, the workshop brought together about 50 theoreticians and experimentalists from around the world in Heidelberg and a further 10 scientists in San Diego, who participated through live video-conferencing sessions.

Organizers from HITS were **Rebecca Wade**, **Daria Kokh**, **Stefan Richter**, **Jon Fuller**, and **Xiaofeng Yu (all MCM)**. Among the sponsors were the BIOMS Heidelberg, the National Biomedical Computation Resource (NCBR), San Diego, and HITS.

Bioinformatics: New type of bacteria found in the human gut

With the help of novel software techniques, a team of molecular biologists and computer scientists was now able to show that around half of the bacteria species in the human gut are yet unknown. In the science magazine Nature Methods, they explain how they analyzed the genetic information of around 250 fecal samples. The enormous amounts of genetic fragments that had been found were digitalized, organized by computer, and assigned to the genomes of about one thousand species. The study was led by Peer Bork (EMBL, Heidelberg). The HITSters **Alexandros Stamatakis** and **Fernando Izquierdo Carrasco (both SCO)** contributed to the publication. “Our new method allows us to finally identify previously unknown species on the basis of a phylogenetic tree,” says Alexandros Stamatakis. The group’s research focusses on developing software and methods for the molecular data analysis in evolutionary biology. At the moment SCO is working on reconstructing phylogenetic trees for insects and birds.

RESEARCH



Bärbel Mack-Reuter, long-standing head of the HITS Administrative Services, has finished her activities at the institute as of September 30, 2013.

In 1997, Bärbel joined the EML European Media Laboratory GmbH as its very first employee. With her extensive administrative experience in the area of universities and foundations, she has been instrumental in administering and developing the company. When EML Research gGmbH was established, one of her major concerns was the organization of the administrative services in such a way as to guarantee that the needs of both companies were met without investing additional effort. When building up HITS, the concepts she had developed once again proved ideal for the realization of a new structure that was viable in the long term. And it is first and foremost due to her dedication that HITS today can rely on a lean and highly efficient administration that effectively supports the researchers of HITS as well as the developers of EML in all aspects.

All of this sounds very formalistic. But everyone who was or is working at HITS knows from personal experience that Bärbel has never been a stern administrator solely abiding by strict rules. Instead, she approached her tasks with the attitude of a problem-solver, and tried to take account of every individual case and every special personal situation. This attitude is also reflected in the way she always described the institute’s administration as “service group” – a point of view that she very successfully passed on to the employees of this group.

The HITS will make an effort to keep up her principle of a personal approach; but the remark that a leader of one of the research groups made upon hearing about her retirement sure is true: “You will leave a big gap.”

We thank Bärbel for her successful work, and wish her all the best for her future.

Imprint | Dr. Peter Saueressig (VisdP), saueressig@h-its.org, Tel. +49 – 6221- 533 245
Pictures: HITS, KTS/ T. Wegner | www.h-its.org

FAREWELL

NR. 13 | 12-2013

Heidelberger Institut für
Theoretische Studien



THE
CHARTS

Neue Gruppe „Computational Statistics“



Zum 1. November startete die neue Forschungsgruppe „Computational Statistics“. Leiter der Arbeitsgruppe ist der Mathematiker **Prof. Tilmann Gneiting**, der zugleich auf eine Professur am Karlsruher Institut für Technologie (KIT) berufen wurde. Gneiting befasst sich mit räumlicher Statistik und vor allem mit der Theorie und Praxis von Vorhersagen, deren mathematische Grundlagen er weiter entwickeln will. Er arbeitet unter anderem auch mit dem Deutschen Wetterdienst zusammen.

Neue Juniorgruppe „Astroinformatik“

Am 1. September nahm die neue Junior-Forschungsgruppe „Astroinformatik“ (AIN) ihre Arbeit am HITS auf. Leiter der neu gegründeten Gruppe ist Dr. Kai Polsterer, der von der Universität Bochum nach Heidelberg gekommen ist. Die Gruppe entwickelt neue Ansätze zur Analyse und Verarbeitung der wachsenden Datenmengen in der Astronomie.



„Die neue Gruppe Computational Statistics ist ein wichtiger Baustein im Konzept des HITS, denn mathematische Methoden sind unerlässlich, um die riesigen Datenberge sinnvoll zu durchdringen.“

Dr. h.c. Dr. E.h. Klaus Tschira, Gründer des HITS

HITS

Rebecca Wade „Associate Editor“



Die Leiterin der Gruppe Molecular and Cellular Modeling (MCM), **Prof. Rebecca Wade**, wurde zur „associate editor“ des Magazins PLOS Computational Biology ernannt.

Das Ziel von PLOS Computational Biology ist die Veröffentlichung herausragender Artikel der Primärforschung zu allen Aspekten der *Computational Biology*, die auf verschiedene und integrierte biologische Skalen angewandt werden, von Molekülen und Zellen bis hin zu Patientenpopulationen und Ökosystemen.

Mit dieser Ernennung setzt Rebecca Wade ihre langjährige Tätigkeit als Redakteurin für verschiedene wissenschaftliche Fachzeitschriften wie BMC Biophysics, Journal of Molecular Recognition und Protein Engineering fort.

Neue Gastwissenschaftler

Im September 2013 kamen folgende Gastwissenschaftler ans HITS: **Katra Kolšek** in die MBM-Gruppe und **Paschalia Kapli** in die SCO-Gruppe. Im Oktober verstärkte der DAAD-Stipendiat **Prajwal Nandekar** die MCM-Gruppe als Gastwissenschaftler. **Dominik Steinhäuser** nahm im November seine Arbeit in der TAP-Gruppe auf.

Neue Mitarbeiter

Im Oktober kam **Alex Judea** als Promotionsstipendiat in die NLP-Gruppe, **Sven Dennis Kügler** in die AIN-Gruppe und **Jolanta Krzyszkowska** als Master-Studentin in die TAP-Gruppe. **Isabel Hartmann** ist seit November als Assistentin der Presse- und Öffentlichkeitsarbeit des HITS tätig.

HITSKÖPFE

Brainstorming über Biologische Diffusion und Brown'sche Dynamik



BDBDB3 knüpfte an die beiden vorangegangenen BDBDB-Treffen an und bot ein Forum für eingehende Diskussionen über die neuesten Erkenntnisse bei Simulationen der Brownschen Dynamik von biologischen Makromolekülen und ähnlichen Methodologien. Weitere Themen waren unter anderem Messungen makromolekularer Diffusion, Membrandiffusion und Proteinassoziation, Interaktionen zwischen Nanopartikeln und Oberflächenproteinen, makromolekulares Crowding und Confinement, hydrodynamische Wechselwirkungen, Dynamik und Beweglichkeit von Makromolekülen, sowie Ansätze im Bereich Multiskalensimulation. Vom 7. bis 9. Oktober 2013 kamen rund 50 Theoretiker und Experimentalisten aus der ganzen Welt im Studio Villa Bosch zusammen. Außerdem nahmen 10 weitere Wissenschaftler aus San Diego per Live-Videokonferenzen an den Sitzungen teil. HITS-Mitglieder im Organisationsteam waren **Rebecca Wade**, **Daria Kokh**, **Stefan Richter**, **Jon Fuller** und **Xiaofeng Yu (alle MCM)**. Die Veranstaltung wurde durch das BIOMS Center Heidelberg, das National Biomedical Computation Resource (NCBR), San Diego, und durch das HITS finanziell unterstützt.

Mit Bioinformatik neue Bakterienarten im menschlichen Darm entdeckt

Mit neuen Software-Methoden konnte ein Team aus Molekularbiologen und Informatikern zeigen, dass rund die Hälfte der Bakterienspezies im menschlichen Darm zu noch unbekanntem Arten gehört. Wie sie im Fachmagazin „Nature Methods“ berichten, untersuchten Forscher um Peer Bork (European Molecular Biology Laboratory, EMBL) die genetischen Informationen aus rund 250 Stuhlproben. Die Unmengen gefundener Erbgutfragmente wurden digitalisiert, per Computer geordnet und dem Erbgut von rund tausend Arten zugeordnet. „Mit unserer neuen Methode können wir erstmals anhand eines Stammbaums auch bisher unbekannte Arten identifizieren“, so **Alexandros Stamatakis (SCO)**. Stamatakis, der zugleich auch eine Professur am Karlsruhe Institut für Technologie (KIT) hat, forscht über die Entwicklung von Software und Methoden zur molekularen Datenanalyse in der Evolutionsbiologie und rekonstruiert Stammbäume von Pflanzen, Insekten und Vögeln.

FORSCHUNG



Bärbel Mack-Reuter, langjährige Leiterin der Verwaltungsgruppe des HITS, hat ihre Tätigkeit am Institut zum 30. September 2013 beendet.

Bärbel kam im Jahr 1997 als erste Mitarbeiterin zur EML European Media Laboratory GmbH. Dort hat sie den Aufbau dieser Firma mit ihrer umfangreichen administrativen Erfahrung aus dem universitären und dem Stiftungs-Umfeld maßgeblich mitgestaltet. Nach der Ausgliederung der EML Research gGmbH war es ihr wesentliches Anliegen, die administrativen Dienste so zu organisieren, dass ohne zusätzlichen Aufwand die Anforderungen beider Firmen erfüllt werden konnten. Die dabei von ihr entwickelten Konzepte erwiesen sich auch beim Aufbau des HITS als ideal geeignet für die Realisierung einer langfristig tragfähigen Struktur. Die Tatsache, dass HITS heute über eine schlanke und sehr effektive Institutsverwaltung verfügt, welche sowohl die Wissenschaftler des HITS als auch die Entwickler des EML in allen Aspekten wirksam unterstützt, ist in allererster Linie ihr Verdienst.

Das klingt bis jetzt alles sehr formalistisch. Doch alle, die am HITS waren oder sind, wissen aus eigener Erfahrung, dass Bärbel nicht als eine an strikten Vorschriften orientierte Verwalterin agiert hat, sondern dass sie ihre Aufgabe als eine Problemlöserin sah, die jedem Einzelfall, jeder besonderen persönlichen Situation Rechnung zu tragen versuchte. Diese Haltung drückte sich auch darin aus, dass sie die Verwaltung immer als eine Service-Gruppe bezeichnete – eine Perspektive, die sie sehr erfolgreich auf die Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter dieser Gruppe übertragen hat.

Das HITS wird sich bemühen, dieses Prinzip des persönlichen Zugangs weiter zu führen, auch wenn der Leiter einer Forschungsgruppe sicher Recht hat, der zu ihrem Ausscheiden sagte: „Du wirst eine große Lücke hinterlassen.“

Wir danken Bärbel sehr herzlich für ihre erfolgreiche Arbeit und wünschen ihr für ihren künftigen Weg alles Gute.

Impressum | Dr. Peter Saueressig (VisdP), saueressig@h-its.org, Tel. +49 – 6221- 533 245
Fotos: HITS, KTS/ T. Wegner | www.H-ITS.org

ABSCHIED

NO 13 | 12-2013

THE
CHARTS

Heidelberg Institute for
Theoretical Studies

