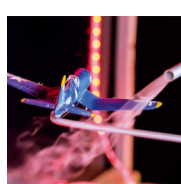


HITS at Explore Science: Everything in motion!



From July 8-12, Explore Science, the science event for children, students, and their families organized by the Klaus Tschira Foundation, took place in Mannheim's Luisenpark. Topic of the 10th edition of this event was "Physics: Pure motion". Like every year, HITS and its scientists participated in this event and presented three interactive hand-in stations that revealed that there is motion everywhere in nature – from the cells to the wind. Starting with the human body, where molecules are bouncing back and forth, motion can of course also be found in the air, for example in the air movement around the wing of an airplane. This year's event attracted around 50,000 visitors that got the chance to delve into science. The next event will take place June 15-19, 2016. Topic: The human.

Young Researchers at HITS

On August 26, 20 Young Researchers from the fields of Mathematics and Computer Science visited HITS in the framework of the 3rd Heidelberg Laureate Forum (August 23-28). During their stay the Young Researchers from all over the world got an overview of the research conducted at HITS and also had the chance to engage in discussions with the HITS researchers. The Heidelberg Laureate Forum is a networking event for mathematicians and computer scientists from all over the world, which offers Young Researchers the opportunity to meet Laureates from their fields.

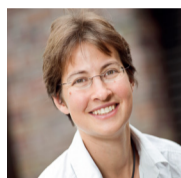


"The Heidelberg Laureate Forum is a fertile ground to make scientists constructive allies to the public."

Dr. Michele Catanzaro (HITS Journalist in Residence 2014), at the 3rd Heidelberg Laureate Forum, August 25, 2015

HITS

How Complex Problems Become Simple – New Research Group



June 1st marked the start of the new associated research group "Groups and Geometry" (GRG) led by **Prof. Anna Wienhard**. In 2012, she joined the University of Heidelberg and was appointed Professor of Pure Mathematics at the Mathematical Institute as well as leader of the research group "Differential Geometry". In 2014, Prof. Wienhard received the "Consolidator Grant" endowment from the European Research Council (ERC) and is a Fellow of the American Mathematical Society. The new research group works in pure mathematics, which, in contrast to applied mathematics, a priori serves no further purpose. Examples of pure mathematics include number theory and logic. Anna Wienhard and her group investigate symmetries and so-called deformation spaces in geometric structures: "We search for and develop structures that significantly simplify complex problems."

Best lecture course @ KIT Computer Science

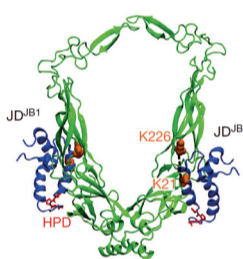


For their lecture course "Introduction to Bioinformatics for Computer Scientists", SCO group members **Alexandros Stamatakis, Andre Aberer, Tomas Flouri, Alexey Kozlov, Kassian Kobert**, and SCO visiting scientist **Mark Holder** (University of Kansas) have been awarded the prize for "the best master's level lecture course in computer science" at the Karlsruhe Institute of Technology. The award is based on the course evaluation by the students. The award was presented during the computer science faculty day in July.

New Staff Members

In August, **Dr. Andreas Bauswein** joined the PSO group as a Postdoc, and **Gaurav Kumar Ganotra** started to work in the MCM group as a doctoral student.

HITSTERS



Human Cells Dissolve Damaging Protein Aggregates

Heidelberg researchers, including HITsters **Prof. Rebecca Wade** and **Antonia Stank (MCM)**, have successfully decoded the fundamental mechanism that is key to dissolving protein aggregates in human cells. During this multi-stage biochemical process, protein molecules are extracted from the aggregates. Researchers at the **Center for Molecular Biology of Heidelberg University (ZMBH)** and the **German Cancer Research Center (DKFZ)** collaborated on the project, along with other scientists from Germany, the USA and Switzerland. The results were published in "Nature" in August.

Proteins in all cells – from bacteria to human – are folded in their native state. This correctly folded state is at constant risk from external and internal influences. Damaged proteins lose their structure, unfold and then tend to clump together. If such aggregates form, they can damage the cells and even cause the cells to die. The researchers succeeded in identifying a previously unknown, multi-component protein complex that efficiently solubilizes stress-induced protein aggregates in vitro.

Rescuing Proteins from Collapse

The structure of a molecule is tightly related to its function. The recent discovery of Intrinsically Disordered Proteins (IDPs) appeared to invalidate such a concept, as IDPs do not show any clear structure but are still able to perform complex functions inside cells. Until now, it was not possible to simulate IDP with computers, since the force fields used for such simulations have been developed to simulate only structured proteins. Therefore, previous simulations of intrinsically disordered proteins were not matching the observations from experiments, the simulated IDPs were too compact. HITS scientists **Dr. Davide Mercadante** and **Prof. Frauke Gräter** from the MBM-group in collaboration with experimental researchers at **EMBL** in Heidelberg have now found a force field that allows the simulation of unstructured proteins. Their findings have been published in **J. Phys. Chem. B**.

RESEARCH

Prof. Dr. Dieter Kranzlmüller, HITS Scientific Advisory Board (Chair)



Since November 2014, Dieter Kranzlmüller has been the chair of the HITS Scientific Advisory Board (SAB). Recalling this meeting, he remembers that the SAB members were really excited about the work of the research groups. "After the first group, we already had 45 minutes of delay because it was so interesting to listen to the researchers." The Austrian-born computer scientist is full professor of computer science at the Ludwig-Maximilians-Universität (LMU) Munich and member of the board of the Leibniz Supercomputing Centre (LRZ) of the Bavarian Academy of Sciences and Humanities. He has worked in parallel computing and computer graphics since 1993, with a special focus on parallel programming and debugging, cluster and especially grid computing. He has participated in several national and international research projects, and has co-authored more than 150 scientific papers in journals, and conference proceedings. Additionally, he is a member of the board of directors of the Center for Digital Technology and Management (CDTM).

Dr. Adele Goldberg, HITS Scientific Advisory Board



„Don't ask whether you can do something, but how to do it." The quote is from Adele Goldberg, one of the computer science pioneers from Xerox PARC. Along with Alan Kay, she developed Smalltalk. Smalltalk was used to prototype the WIMP (windows, icons, menus, pointers) interface at Xerox PARC, the cornerstone for today's modern graphical user interfaces. Born in Cleveland, Ohio, Adele Goldberg received her PhD in information science from the University of Chicago in 1973, while working as a research associate at Stanford University. She has served as president of the ACM from 1984 until 1986 and has received numerous awards for her contributions to computing. She cofounded Neometron, Inc., an Internet support provider in Palo Alto, California, and is working with drug development teams, international research programs, and educational technology. Since 2014, she has been a member of the HITS Scientific Advisory Board.

IMPRINT | DR. PETER SAUERESSIG (VISDP), SAUERESSIG@HITS.ORG, TEL. +49 - 6221 - 533 245
PHOTOS: HITS, GÜLAY KESKIN, UNIVERSITY OF CHICAGO / POLSKY CENTER FOR ENTREPRENEURSHIP | WWW.HITS.ORG

PORTRAIT

NR. 20 | 09-2015

Heidelberger Institut für
Theoretische Studien



THE
CHARTS

HITS bei Explore Science: Alles in Bewegung!



Vom 8. bis 12. Juli 2015 fanden im Mannheimer Luisenpark zum 10. Mal die naturwissenschaftlichen Erlebnistage der Klaus Tschira Stiftung zum Thema „Physik: Bewegung pur“ statt. Auch in diesem Jahr war das HITS wieder mit dabei. Unter dem Motto „Alles in Bewegung – von der Zelle bis zum Wind“ präsentierten die HITS-Wissenschaftler drei spannende Mitmachstationen, die zeigten, wo es überall in der Natur Bewegung gibt. Angefangen im menschlichen Körper, wo sich Moleküle wackelnd hin und her bewegen, bis hin zur Luft, die sich um die Tragflächen eines Flugzeugs bewegt. Knapp 50.000 Besucher kamen in den Luisenpark, um Wissenschaft hautnah zu erleben. Die nächste Veranstaltung findet vom 15.-19. Juni 2016 zum Thema „Mensch“ statt.

Young Researchers am HITS

Am 26. August besuchten 20 „Young Researchers“ aus den Bereichen Mathematik und Informatik das HITS im Rahmen des 3. Heidelberg Laureate Forums (HLF, 23.-28.08.2015). Während ihres Besuchs am Institut erhielten die Nachwuchswissenschaftler aus aller Welt einen Einblick in die Arbeit und Forschung des HITS und hatten außerdem die Gelegenheit, sich mit den HITS-Wissenschaftlern direkt auszutauschen. Das HLF bietet ausgewählten Nachwuchswissenschaftlern der Mathematik und Informatik die einzigartige Möglichkeit, die bedeutendsten Wissenschaftler ihres Fachbereiches zu treffen.

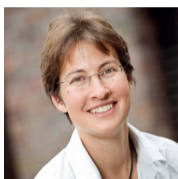


„Das Heidelberg Laureate Forum ist ein fruchtbarer Nährboden, um Wissenschaftler zu kreativen Verbündeten der Öffentlichkeit zu machen.“

Dr. Michele Catanzaro (HITS Journalist in Residence 2014) beim 3. Heidelberg Laureate Forum am 25.08.2015

HITS

Wie komplexe Probleme einfach werden – neue Forschungsgruppe



Im Juni startete die neue assoziierte Forschungsgruppe „Gruppen und Geometrie“ (GRG) unter der Leitung von **Prof. Anna Wienhard** am HITS. Anna Wienhard ist seit 2012 Professorin für Reine Mathematik an der Fakultät für Mathematik und Informatik der Universität Heidelberg und leitet dort die Arbeitsgruppe „Differentialgeometrie“. Sie erhielt 2014 den „Consolidator Grant“ des European Research Council (ERC), außerdem ist sie Fellow der American Mathematical Society. Die neue HITS-Forschungsgruppe befasst sich mit Reiner Mathematik, die im Unterschied zur Angewandten Mathematik a priori keinem äußeren Zweck dient – Beispiele dafür sind Zahlentheorie oder Logik. Anna Wienhard und ihr Team untersuchen Symmetrien und sogenannte Deformationsräume in geometrischen Strukturen: „Wir suchen nach und entwickeln Strukturen, die komplexe Probleme signifikant vereinfachen.“

HITS: Die beste Informatik-Vorlesung am KIT

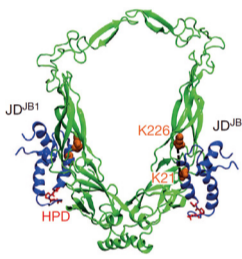


Wissenschaftler der Scientific Computing Group (SCO) des HITS erhielten eine Auszeichnung für die beste Vorlesung im Wahlbereich des Masterstudienganges Informatik am Karlsruher Institut für Technologie (KIT). Die Auszeichnung basiert auf der Auswertung der Vorlesungsevaluierung. Gruppenleiter **Alexandros Stamatidis** und **Andre Aberer**, **Tomas Flouri**, **Alexey Kozlov**, **Kassian Kobert** sowie der Gastwissenschaftler **Mark Holder** (University of Kansas) erhielten den Preis für die Lehrveranstaltung „Introduction to Bioinformatics for Computer Scientists.“ Der Preis wurde im Juli im Rahmen des Tages der Informatik am KIT verliehen.

Neue Mitarbeiter

Seit August ist **Dr. Andreas Bauswein** als Postdoc in der PSO-Gruppe und **Gaurav Kumar Ganotra** als Doktorand in der MCM-Gruppe.

HITSKÖPFE



Menschliche Zellen lösen verklumpte Proteine auf

Heidelberger Wissenschaftler, darunter auch die HITS-Forscherinnen **Prof. Rebecca Wade** und **Antonia Stank (MCM)**, haben jetzt den fundamentalen Mechanismus entschlüsselt, der in menschlichen Zellen beim Auflösen von verklumpten Proteinen zum Tragen kommt. Bei diesem mehrstufigen biochemischen Vorgang werden Proteinmoleküle aus den Verklumpungen herausgelöst. Am Projekt beteiligt waren Forscher des **Zentrums für Molekulare Biologie der Universität Heidelberg (ZMBH)**, des **Deutschen Krebsforschungszentrums (DKFZ)** sowie Wissenschaftler aus Deutschland, den USA und der Schweiz. Die Ergebnisse wurden in „Nature“ im August veröffentlicht.

In allen Zellen, vom Bakterium bis zum Menschen, treten Proteine in ihrem natürlichen Zustand gefaltet auf. Dieser Zustand der korrekten Faltung ist ständig durch äußere und innere Einflüsse bedroht. Schadhafte Proteine verlieren ihre Struktur und entfalten sich. Dabei besteht die Gefahr, dass sie miteinander verklumpen. Kommt es zu Verklumpungen, kann dies Zellen schädigen oder sogar zum Zelltod führen. Den Forschern ist es nun gelungen, einen bisher unbekannt Proteinkomplex zu identifizieren, der unter in-vitro-Bedingungen wirksam stressbedingte Verklumpungen von Proteinen auflöst.

Proteine vor dem Kollaps bewahren

Die Struktur eines Moleküls ist eng mit seiner Funktion verknüpft. Doch vor kurzem wurden intrinsisch ungeordnete Proteine (IDP, „Intrinsically Disordered Proteins“) entdeckt, die diese These zu widerlegen scheinen: Sie weisen keine klare Struktur auf, erfüllen aber komplexe Funktionen innerhalb von Zellen. Bisher ließen sich solche IDP nicht am Computer simulieren, da die für die Simulationen verwendeten Kraftfelder für Proteine mit einer klaren Struktur entwickelt wurden. Deshalb stimmten bisherige Simulationen von unstrukturierten Proteinen nicht mit den Beobachtungen aus Experimenten überein, die Proteine verklumpten in den Simulationen zu stark. Die HITS-Forscher **Dr. Davide Mercadante** und **Prof. Frauke Gräter** (MBM) haben zusammen mit experimentellen Wissenschaftlern des **EMBL Heidelberg** ein Kraftfeld gefunden, mit dem solche Simulationen möglich sind. Die Ergebnisse wurden im **Journal of Physical Chemistry B** veröffentlicht.

FORSCHUNG

Prof. Dr. Dieter Kranzlmüller, HITS Scientific Advisory Board (Vorsitz)



Seit November 2014 ist Dieter Kranzlmüller der Vorsitzende des wissenschaftlichen Beirats des HITS (Scientific Advisory Board - SAB). Er erinnert sich, dass die SAB-Mitglieder beim ersten Treffen am HITS außerordentlich begeistert von der Arbeit der Forschungsgruppen waren: „Nach der ersten Gruppe hatten wir bereits 45 Minuten Verspätung, weil es so interessant war, den Forschern zuzuhören.“ Der geborene Österreicher hat einen Lehrstuhl für Informatik an der Ludwig-Maximilians-Universität (LMU) München inne und ist Direktor und Vorstandsmitglied des Leibniz Rechenzentrums (LRZ) der Bayerischen Akademie der Wissenschaften. Seit 1993 hat sich Kranzlmüller mit Parallelrechnen und Computergraphik befasst, mit einem Schwerpunkt auf Parallelprogrammierung und Fehleranalyse, auf Clusterrechnen und speziell auf Grid-Computing. Er wirkte in zahlreichen nationalen und internationalen Forschungsprojekten mit und ist Co-Autor von mehr als 150 wissenschaftlichen Publikationen in Zeitschriften und Tagungsberichten. Außerdem ist er Vorstandsmitglied des Center for Digital Technology and Management (CDTM) in München.

Dr. Adele Goldberg, HITS Scientific Advisory Board



„Frage nicht, ob du etwas kannst, sondern wie es funktioniert.“ Dieses Zitat stammt von Adele Goldberg, einer Informatikerin der ersten Stunde aus dem legendären Xerox PARC. Gemeinsam mit Alan Kay entwickelte sie *Smalltalk*. Diese Programmiersprache wurde verwendet, um das WIMP-Interface (windows, icons, menus, pointers) in Xerox PARC zu entwickeln, den Grundstein der heutigen grafischen Benutzeroberflächen. Adele Goldberg wurde in Cleveland, Ohio, geboren. 1973 wurde sie an der University of Chicago in Informationswissenschaft promoviert, zugleich war sie als wissenschaftliche Mitarbeiterin an der Stanford University beschäftigt. Sie war von 1984 bis 1986 Präsidentin der ACM (Association for Computing Machinery) und erhielt für ihre Beiträge zum *Computing* zahlreiche Preise. Sie ist Mitgründerin von Neometron, Inc., einem Internetunternehmen in Palo Alto, Kalifornien, kooperiert mit Teams in der Medikamentenentwicklung, wirkt in internationalen Forschungsprogrammen mit und arbeitet an Technologien im Bildungsbereich. Seit 2014 ist Adele Goldberg Mitglied des HITS Scientific Advisory Board.

IMPRESSUM | DR. PETER SAUERESSIG (VISDP), SAUERESSIG@HITS.ORG, TEL. +49 - 6221 - 533 245
FOTOS: HITS, GÜLAY KESKIN, UNIVERSITY OF CHICAGO / POLSKY CENTER FOR ENTREPRENEURSHIP | WWW.HITS.ORG

PORTRAIT

NO 20 | 09-2015

Heidelberg Institute for
Theoretical Studies



THE CHARTS