

HITS

HITS and Yale : Over the ocean, across the Universe

HITS and Yale University, New Haven/U.S, have started a joint initiative to foster collaboration between astronomers and astrophysicists on both sides of the pond: the HITS-Yale Program in Astrophysics, funded for a four-year period by the Klaus Tschira Stiftung (KTS). The program is jointly run by **Prof. Volker Springel**, head of the Theoretical Astrophysics group at HITS, and **Prof. Frank van den Bosch** from Yale University. It includes funding for two “Tschira” postdoctoral fellows, named after the physicist Klaus Tschira (1940-2015), the founder of the KTS. The KTS promotes the advancement of natural sciences, mathematics, and computer science. Each fellow will spend two years at Yale and two years at HITS for a research stay. The Astrophysicist **Dr. Freeke van de Voort** came to HITS in October 2016. She is an expert in hydrodynamical simulations of galaxy formation. Her colleague **Nir Mandelker** began his stay at Yale at the same time. He works on violent disk instabilities, compressible turbulence, and instabilities in cold streams. The collaboration will also include research meetings at HITS and Yale.

HITS opens second site in the “Mathematikon”

In September, HITS opened a second site at the “**Mathematikon**”, Berliner Str. 45, thus enhancing its presence on the University campus in Neuenheimer Feld. The **Scientific Databases and Visualization** group, which collaborates closely with scientists at Heidelberg University and the German Cancer Research Center, now have their offices in the Mathematikon. There is also a conference room that is used for internal meetings and gatherings with partners from the University.

Strengthening mathematics and computer science

HITS and Heidelberg University are scientific partners of the Heidelberg Laureate Forum Foundation – offering sustainable and professional support to the annual meeting of top mathematics and computer science researchers. This photo shows the signing ceremony in September 2016.

HITS researcher appointed as SAB member of the Greek ELIXIR National Node

Prof. Alexandros Stamatakis, head of the SCO group at HITS, has been appointed as member of the Scientific Advisory Board of ELIXIR-GR. This is the Greek node of ELIXIR, a distributed infrastructure for life science information that unites Europe’s leading life science organizations in managing and safeguarding the increasing volume of data being generated by publicly funded research. www.elixir-europe.org

New staff members and visiting scientists

GRG: **Dr. Federica Fanoni**, **Johannes Horn**, **Christoph Karg**, **Evgenii Ragozinnikov**, **Dr. Andy Sanders**, all visiting scientists, Heidelberg University

HAC: **Dr. Philipp Girichidis**, postdoc, **Georg Winner**, PhD student, visiting scientist, Heidelberg Graduate School of Fundamental Physics

MBM: **Dr. Agnieszka Obarska-Kosinska**, postdoc, CellNetworks

MCM: **Rebecca Neil**, Erasmus student, Imperial College, London/UK

NLP: **Feifei Peng**, PhD student

PSO: **Dr. Markus Kromer**, Gliese fellow, visiting scientist, Zentrum für Astronomie, Heidelberg University

SCO: **Pierre Barbera**, PhD student, **Benoit Morel**, PhD student, **Nikolaos Psonis**, visiting scientist, University of Crete

SDBV: **Marcel Petrov**, DHBW student

TAP: **Felipe Goicovic**, visiting scientist, Universidad Católica de Chile, **Dr. Thomas Guillet**, visiting scientist, Heidelberg University, **Dr. Freeke van de Voort**, Tschira Fellow in the HITS-Yale program.

HITS groups: Astroinformatics (AIN), Computational Biology (CBI), Computational Statistics (CST), Data Mining and Uncertainty Quantification (DMQ), Groups and Geometry (GRG), High-Energy Astrophysics and Cosmology (HAC), Molecular Biomechanics (MBM), Molecular and Cellular Modeling (MCM), Natural Language Processing (NLP), Physics of Stellar Objects (PSO), Scientific Computing (SCO), Scientific Databases and Visualization (SDBV), Theoretical Astrophysics (TAP).

On the front cover: Molecular dynamics involved in DNA compaction

DNA is packaged in the cell nucleus by wrapping around proteins called histones to form chromatin fibers. Nucleosomes, the structural units of these fibers, are formed by wrapping 146 base pairs of DNA around eight histones. Additional histone proteins, known as linker histones, bind to nucleosomes in a 1:1 ratio to form chromatosomes. The study of the dynamics of chromatosome formation carried out by HITS researchers **Mehmet Öztürk** and **Prof. Rebecca Wade** (Molecular and Cellular Modeling group) together with HITS alumnus **Dr. Vlad Cojocaru** (Max Planck Institute for Molecular Biomedicine, Münster) was published in the August issue of Nucleic Acids Research (NAR) with a front cover illustration. In this study, classical and accelerated molecular dynamics simulations and Brownian dynamics simulations were used to investigate how the linker histone known as H5 binds to nucleosomes. Based on the findings presented, the authors proposed that chromatosomes do not have a single defined geometry, but multiple ones depending on the dynamic shapes (conformation) of the interacting nucleosome and linker histone. This concept represents an important contribution towards understanding how DNA compacts in the cell nucleus. (*Publication: Mehmet Ali Öztürk, Georgi V. Pachov, Rebecca C. Wade, Vlad Cojocaru. Conformational selection and dynamic adaptation upon linker histone binding to the nucleosome Nucl. Acids Res. (19 August 2016) 44 (14): 6599–6613.*)

On the way to better understanding the Universe

How did the Universe form matter in the first moments after the Big Bang? How did the first stars emerge and evolve into galaxies? These questions will form the focus of the new ARC Centre of Excellence for All Sky Astrophysics in 3 Dimensions (**CAASTRO 3D**), a 25 million Euro international project funded by the Australian Research Council (ARC), involving around 200 investigators at institutions from three continents– astronomers, astrophysicists, engineers and computer scientists. The center is led by Prof. Lisa Kewley from the Australian National University. The 15 partners hail from Australia, the USA, Canada, the UK, China and the Netherlands. HITS is the only German institution participating. The research groups Astroinformatics (Head: **Dr. Kai Polsterer**), Physics of Stellar Objects (Head: **Prof. Friedrich Röpke**) and Theoretical Astrophysics (Head: **Prof. Volker Springel**) are bringing in their scientific expertise in galaxy formation, dark matter, supernovae and machine learning methods for analyzing big data in astronomy.

Prof. Dr. Stefan W. Hell, HITS Scientific Advisory Board

Stefan Hell pioneered breaking the diffraction resolution barrier in a light microscope using conventional lenses – a crucial achievement for biomedical research. He invented and developed STED (“Stimulated Emission Depletion”) microscopy. He was awarded the Nobel Prize in Chemistry in 2014 for his contributions. Born in Arad, Romania, Hell studied in Heidelberg and earned his PhD in physics in 1990. He then worked at the European Molecular Biology Laboratory, also in Heidelberg, and at the University of Turku, Finland. After attaining his habilitation in 1996 at Heidelberg University, he joined the Max Planck Institute for Biophysical Chemistry in Göttingen. Since 2002, he has acted as Director of this institute. In 2003, he became head of the Optical Nanoscopy Division at the German Cancer Research Center (DKFZ) in Heidelberg. Since December 2014, Hell has been a member of the HITS Scientific Advisory Board.

Prof. Dr. Dr. Thomas Lengauer, HITS Scientific Advisory Board

Thomas Lengauer is director at the Max Planck Institute for Informatics (MPI-INF) in Saarbrücken, Germany. He studied Mathematics (Dr. rer. nat., FU Berlin 1976) and Computer Science (Ph.D., Stanford 1979). From 1979 to 1981, he worked at Bell Labs before he returned to Germany. After achieving his habilitation, he became a full professor at the University of Paderborn (1984-1992). From 1992 to 2001, Lengauer was a full professor at the University of Bonn and director of the Institute for Algorithms and Scientific Computing at GMD – the German National Research Center for Computer Science in Sankt Augustin. Since 2001, he has been director of the Department for Computational Biology and Applied Algorithmics at the MPI-INF. Lengauer’s field of research is computational biology with an emphasis on disease-related topics. He has received numerous awards, among them the Konrad Zuse Medaille and the Karl Heinz Beckurts Preis. In September 2016, he became President-Elect of the International Society for Computational Biology. Since 2014, Thomas Lengauer 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, BERND SCHULLER/MPIBPC, CHRISTOF RIEKEN FOR LEOPOLDINA, STEFAN TAUBENBERGER, BERNHARD KREUTZER,
GÜLAY KESKIN, MATHEMATIKON HEIDELBERG GMBH (N. SCHW. R.) & Co KG | WWW.HITS.ORG

PORTRAIT

NR. 25 | 12-2016

Heidelberger Institut für
Theoretische Studien



THE CHARTS

HITS

HITS und Yale: Gemeinsame Galaxienforschung

Das HITS und die Universität Yale, New Haven/USA, verstärken mit einem neuen Programm die Kooperation zwischen Astrophysikern und Astronomen in Deutschland und den USA. Das HITS-Yale-Programm in Astrophysik wird von der Klaus Tschira Stiftung (KTS) zunächst für die Dauer von vier Jahren gefördert. **Prof. Volker Springel**, Leiter der HITS-Gruppe Theoretical Astrophysics, und **Prof. Frank van den Bosch** von der Universität Yale organisieren das Programm. Es umfasst zwei „Tschira“-Stipendien, benannt nach dem Physiker Klaus Tschira (1940-2015), der 1995 die KTS zur Förderung der Naturwissenschaften, Mathematik und Informatik gründete. Die ausgewählten Stipendiaten verbringen jeweils einen zweijährigen Gastaufenthalt in Yale und am HITS. Die Astrophysikerin **Dr. Freeke van de Voort** kam im Oktober 2016 ans HITS. Sie ist Expertin für hydrodynamische Simulationen der Galaxienentstehung. Ihr Kollege **Nir Mandelker** begann zeitgleich seinen Aufenthalt in Yale. Er arbeitet auf dem Gebiet instabiler Scheibengalaxien, Gasturbulenzen und kalter Gasströme. Neben den Stipendien umfasst der Austausch regelmäßige Treffen von Forschern aus dem HITS und aus Yale.

Zweiter Standort im Mathematikon

Das HITS verfügt jetzt über einen zweiten Standort im **Mathematikon**, Berliner Str. 45. Das Institut ist damit auch auf dem Campus der Universität Heidelberg präsent. In den Räumen ist die Forschungsgruppe **Scientific Databases and Visualization** untergebracht, die eng mit Forschern der Universität und des Deutschen Krebsforschungszentrums (DKFZ) zusammenarbeitet. Außerdem steht ein Konferenzraum für interne Treffen sowie für den Austausch mit universitären Partnern zur Verfügung.

Mathematik und Informatik stärken: HITS und Universität Heidelberg unterstützen als wissenschaftliche Partner der Heidelberg Laureate Forum Foundation das jährliche Treffen der Spitzenforscher aus Mathematik und Informatik. Das Foto entstand bei der Vertragsunterzeichnung im September 2016.

HITS

HITS-Forscher ist neues Mitglied im Wissenschaftlichen Beirat von ELIXIR

Prof. Alexandros Stamatakis, Leiter der SCO Gruppe, wurde zum neuen Mitglied des Wissenschaftlichen Beirats von ELIXIR-GR ernannt, dem griechischen Knotenpunkt von ELIXIR. Dieses Netzwerk verbindet Europas führende biowissenschaftliche Organisationen und unterstützt sie bei der Verwaltung und Sicherung der stetig wachsenden Datenmenge, die durch öffentlich finanzierte Forschung entsteht. www.elixir-europe.org

Neue Mitarbeiter und Gastwissenschaftler

GRG: **Dr. Federica Fanoni**, **Johannes Horn**, **Christoph Karg**, **Evgenii Ragozinnikov**, **Dr. Andy Sanders**, alle Gastwissenschaftler, Univ. Heidelberg

HAC: **Dr. Philipp Girichidis**, Postdoc, **Georg Winner**, Doktorand, Gastwissenschaftler, Heidelberg Graduate School of Fundamental Physics

MBM: **Dr. Agnieszka Obarska-Kosinska**, Postdoc, Exzellenzcluster CellNetworks

MCM: **Rebecca Neil**, Erasmus-Studentin, Imperial College, London/UK

NLP: **Feifei Peng**, Doktorandin

PSO: **Dr. Markus Kromer**, Gliese Fellow, Gastwissenschaftler, Zentrum für Astronomie, Univ. Heidelberg

SCO: **Pierre Barbera**, Doktorand, **Benoit Morel**, Doktorand, **Nikolaos Psonis**, Gastwissenschaftler, Univ. Kreta

SDBV: **Marcel Petrov**, DHBW-Student

TAP: **Felipe Goicovic**, Gastwissenschaftler, Universidad Católica de Chile, **Dr. Thomas Guillet**, Gastwissenschaftler, Univ. Heidelberg, **Dr. Freeke van de Voort**, Tschira Fellow im HITS-Yale-Programm (siehe „HITS“).

HITS Gruppen: Astroinformatics (AIN), Computational Biology (CBI), Computational Statistics (CST), Data Mining and Uncertainty Quantification (DMQ), Groups and Geometry (GRG), High-Energy Astrophysics and Cosmology (HAC), Molecular Biomechanics (MBM), Molecular and Cellular Modeling (MCM), Natural Language Processing (NLP), Physics of Stellar Objects (PSO), Scientific Computing (SCO), Scientific Databases and Visualization (SDBV), Theoretical Astrophysics (TAP).

HITSKÖPFE

Auf der Titelseite: Molekulare Dynamik an DNA-Verdichtung beteiligt

Die DNA wird im Zellkern verpackt, indem sie sich um sogenannte Histon-Proteine wickelt und so Chromatinfasern bildet. Nukleosomen, die Struktureinheiten dieser Fasern, werden gebildet, indem sich 146 DNA-Basenpaare um acht Histone wickeln. Zusätzliche Histon-Proteine, die „Verbindungshistone“ genannt werden, binden in einem Verhältnis von 1:1 an Nukleosomen, um Chromosomen zu bilden. Die HITS-Forscher **Mehmet Öztürk** und **Prof. Rebecca Wade** (Molecular and Cellular Modeling Gruppe) untersuchten mit HITS-Alumnus **Dr. Vlad Cojocaru** (Max-Planck-Institut für molekulare Biomedizin, Münster) die Dynamik der Chromosombildung und veröffentlichten ihre Ergebnisse im Fachjournal „Nucleic Acids Research“ mit einem Bild auf der Titelseite. Die Studie analysierte mit klassischen und beschleunigten Molekulardynamik-Simulationen sowie Brownschen Dynamik-Simulationen, wie das als H5 bekannte „Verbindungshiston“ an Nukleosomen bindet. Die Forscher nehmen an, dass Chromosomen keine einzelne Form besitzen, sondern mehrere, abhängig von den dynamischen Formen (Konformation) der zusammenwirkenden Nukleosomen und „Verbindungshistone“. Dieser neue wissenschaftliche Ansatz leistet einen wichtigen Beitrag zum Verständnis darüber, wie sich die DNA im Zellkern verdichtet. (*Mehmet Ali Öztürk, Georgi V. Pachov, Rebecca C. Wade, Vlad Cojocaru. Conformational selection and dynamic adaptation upon linker histone binding to the nucleosome Nucl. Acids Res. (19 August 2016) 44 (14): 6599–6613.*)

Das Universum in 3D

Wie bildete das Universum die Materie in den ersten Momenten nach dem Urknall? Wie entstanden die ersten Sterne und schließlich die Galaxien? Diese Fragen stehen im Zentrum des neuen „ARC Centre of Excellence for All Sky Astrophysics in 3 Dimensions“ (**CAASTRO3D**). Das internationale Projekt wird mit umgerechnet 25 Millionen Euro vom Australischen Forschungsrat (ARC) gefördert. 200 Astronomen, Astrophysiker, Ingenieure und Informatiker aus drei Kontinenten sind beteiligt. Die Leitung des Projekts hat Prof. Lisa Kewley (Australian National University). Die 15 Partner sind aus Australien, USA, Kanada, China und den Niederlanden. Als einzige deutsche Institution ist das HITS beteiligt. Die Forschungsgruppen Astroinformatics (Leiter: **Dr. Kai Polsterer**), Physics of Stellar Objects (Leiter: **Prof. Friedrich Röpke**) und Theoretical Astrophysics (Leiter: **Prof. Volker Springel**) bringen ihre wissenschaftliche Expertise ein - in Galaxienbildung, Dunkle Materie, Supernovae sowie in Methoden maschinellen Lernens für den Umgang mit „Big Data“ in der Astronomie.

FORSCHUNG

Prof. Dr. Stefan W. Hell, HITS Scientific Advisory Board

Stefan W. Hell ist der Entwickler des ersten mikroskopischen Verfahrens, mit dem man mit fokussiertem Licht Auflösungen weit unterhalb der Lichtwellenlänge erzielen kann - eine Entdeckung von großer Bedeutung für die biomedizinische Forschung. Er entwickelte die sogenannte „Stimulated Emission Depletion“, kurz STED-Mikroskopie. Dafür erhielt er 2014 den Nobelpreis für Chemie. Der im rumänischen Arad geborene Hell studierte in Heidelberg und wurde dort 1990 in Physik promoviert. Ab 1991 arbeitete er am Europäischen Laboratorium für Molekularbiologie (EMBL) in Heidelberg und an der Universität Turku in Finnland. Nach seiner Habilitation 1996 in Heidelberg ging er 1997 ans Max-Planck-Institut für Biophysikalische Chemie in Göttingen und ist dort seit 2002 Direktor. 2003 wurde er Leiter der Abteilung Optische Nanoskopie am Deutschen Krebsforschungszentrum in Heidelberg. Seit Dezember 2014 ist Stefan Hell Mitglied des Wissenschaftlichen Beirats des HITS.

Prof. Dr. Dr. Thomas Lengauer, HITS Scientific Advisory Board

Thomas Lengauer ist Direktor am Max-Planck-Institut für Informatik (MPI-INF) in Saarbrücken. Er studierte Mathematik an der FU Berlin (Promotion 1976) und Computer Science an der Stanford University in den USA (Promotion 1979). Von 1979 bis 1981 war er bei Bell Labs, New Jersey, beschäftigt. Zurück in Deutschland habilitierte er sich an der Universität des Saarlandes. 1984 wurde er an der Universität Paderborn zum Professor ernannt. Von 1992 bis 2001 war er Professor an der Universität Bonn und zugleich Direktor des Instituts für Algorithmisches und Wissenschaftliches Rechnen bei GMD – Forschungszentrum Informationstechnik in Sankt Augustin. Seit 2001 ist er Direktor der Arbeitsgruppe „Bioinformatik und Angewandte Algorithmik“ des MPI-INF. Thomas Lengauers Forschungsinteressen liegen im Bereich der Bioinformatik mit besonderer Ausrichtung auf krankheitsbezogene Themen. Er erhielt zahlreiche Preise, darunter die Konrad Zuse Medaille und den Karl Heinz Beckurts Preis, und wurde im September 2016 zum künftigen Präsidenten der International Society for Computational Biology (ISCB) gewählt. Seit 2014 ist Thomas Lengauer Mitglied des Wissenschaftlichen Beirats des HITS.

IMPRESSUM | DR. PETER SAUERESSIG (VISDP), SAUERESSIG@HITS.ORG, TEL. +49 6221- 533 245
FOTOS: HITS, BERND SCHULLER/MPIBPC, CHRISTOF RIEKEN FÜR DIE LEOPOLDINA, STEFAN TAUBENBERGER, BERNHARD KREUTZER, GÜLAY KESKIN, MATHEMATIKON HEIDELBERG GMBH (N. SCHW. R.) & CO KG | WWW.HITS.ORG

PORTRAIT

NO 25 | 12-2016

Heidelberg Institute for
Theoretical Studies



THE
CHARTS