



## Nächste Runde: „HITS Journalist in Residence“ Programm

Das Programm „Journalist in Residence“ geht in die nächste Runde, dieses Mal für die Jahre 2020 und 2021. Es richtet sich an Wissenschaftsjournalistinnen und -journalisten mit mindestens fünf Jahren Erfahrung und einem Fokus auf Naturwissenschaften und Technik. Ihnen bietet das HITS einen Gastaufenthalt von drei bis sechs Monaten an, der mit 5000 Euro monatlich dotiert ist. Ein Ziel ist es, den Austausch zwischen Journalisten und Wissenschaftlern zu fördern. Durch den täglichen Kontakt mit den Forscherinnen und Forschern erhalten die „Journalists in Residence“ ein besseres Verständnis, wie moderne Forschung funktioniert und wie Forscherinnen und Forscher denken. Eine Gegenleistung in Form einer Veröffentlichung mit Bezug zum HITS wird nicht erwartet. Der Gastaufenthalt dient ausdrücklich der Förderung eines unabhängigen Journalismus. Bewerbungsschluss ist der 10. September 2019.

Seit 2012 waren sieben „Journalists in Residence“ am HITS, aus den USA, Spanien, Deutschland und Indien. Sie konnten ihren Aufenthalt auch nachhaltig nutzen. Zum Beispiel schrieb der Wissenschaftsjournalist Volker Stollorz während seines Aufenthalts am HITS das Konzept für ein deutsches Science Media Center. Im Jahr 2016 wurde das „Science Media Center Germany“ gegründet.



## Jubiläum: „COMBINE“ Meeting in Heidelberg

Die internationale Initiative „Computational Modeling in Biology Network“ (COMBINE) wurde vor zehn Jahren gegründet, um die Entwicklung verschiedener Standards und Formate in der Systembiologie, der synthetischen Biologie und verwandten Feldern zu koordinieren. Zum 10-jährigen Jubiläum trifft sich das Netzwerk vom 15. bis 19. Juli 2019 im Studio Villa Bosch in Heidelberg. „COMBINE 2019“ ist wie ein Workshop organisiert, mit Vorträgen, Präsentationen und Postern. Es bleibt aber auch genügend Zeit für nachmittägliche „breakout sessions.“ Bei dem Treffen werden auch Werkzeuge vorgestellt, die COMBINE-Standards nutzen. Veranstalter sind internationale Mitglieder des Netzwerks, darunter **Martin Golebiewski** und **Wolfgang Müller** von der Scientific Databases and Visualization Gruppe (SDBV) am HITS. Weitere Informationen: [www.co.mbine.org](http://www.co.mbine.org)

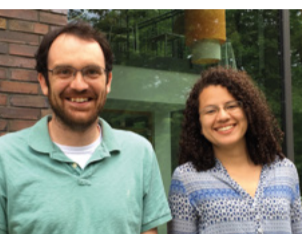


„Wir denken über Fachgrenzen hinaus.“ Wolfgang Müller, HITS-Institutssprecher

HITS

## Humboldt-Stipendiaten am HITS

Seit 2012 war das HITS Gastgeber für acht Aufenthalte von Stipendiaten der Alexander-von-Humboldt-Stiftung. Auch in diesem Jahr kann das Institut wieder zwei „Humboldtianer“ begrüßen: **Prof. Kevin Hinkle** (University of Dayton, Ohio/USA) kehrte nach einem ersten Aufenthalt im vergangenen Jahr für weitere drei Monate mit einem Forschungsstipendium für Postdoktoranden ans HITS zurück, um in der MBM-Gruppe am Einfluss von Zugkraft auf Biopolymere auf unterschiedlichen Größenskalen zu forschen. **Dr. Ariane Nunes-Alves** erhielt ein Capes-Humboldt Forschungsstipendium für Postdoktoranden, das am 1. Juli 2019 begann. Sie arbeitet bereits seit 2018 in der MCM-Gruppe und entwickelt neue Vorhersagemethoden für die Bindungsdauer von Medikamenten an Proteinen.



## HITS-Forscherinnen in Journal-Gremien berufen

Zwei HITS-Wissenschaftlerinnen wurden jetzt zu Gremienmitgliedern des „Journal of Chemical Information and Modeling“ (JCIM) ernannt, das zu den Zeitschriften der „American Chemical Society“ gehört. MCM-Gruppenleiterin **Prof. Rebecca Wade** ist seit Anfang 2019 Mitglied des „Editorial Board of the Journal of Chemical Information and Modeling.“ Außerdem wurde **Dr. Ariane Nunes-Alves** (ebenfalls MCM) in das „Early Career Board of the Journal of Chemical Information and Modeling“ für die Jahre 2019-2021 berufen.



## Neue MitarbeiterInnen und GastwissenschaftlerInnen

- CME:** Johanna Wegmann, Masterandin
- CST:** Dr. Timo Dimitriadis, Mitarbeiter
- MBM:** Fabian Kutzki, Gastwissenschaftler / Martin Richter, Masterand / Nicholas Michelarakis, Mitarbeiter / Dr. Markus Kurth, Postdoc
- MCM:** Anton Hanke, Bachelorand
- PSO:** David Bubeck, Masterand
- SDBV:** Natalia Simous, Mitarbeiterin

### HITS Gruppen (07/2019)

Astroinformatik (AIN), Computational Carbon Chemistry (CCC), Computational Statistics (CST), Data Mining and Uncertainty Quantification (DMQ), Groups and Geometry (GRG), 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).

HITSKÖPFE

## „Deep Learning“ und mathematische Statistik: Interdisziplinarität trägt Früchte

Vor knapp vier Jahren begannen Mitglieder der beiden HITS-Forschungsgruppen Astroinformatik (AIN) und Computational Statistics (CST) mit einem wissenschaftlichen Gedankenaustausch, der schließlich in zwei Publikationen mündete: Zum einen entwickelte **Dr. Sebastian Lerch** (CST) ein neuronales Netz, das für bessere Temperaturvorhersagen sorgt als klassische Standardverfahren. Die Anregung dazu erhielt er durch ein internes Seminar über maschinelles Lernen am HITS, das **Dr. Antonio D'Isanto** (AIN) hielt. Zum anderen entwickelten Antonio D'Isanto und **Dr. Kai Polsterer** (beide AIN) eine neue Methode für die Vorhersage der photometrischen Rotverschiebung durch „Deep Learning“-Verfahren. Die Vorhersagequalität übertrifft alle bisherigen Referenzmethoden. Der Grund: Die AIN-Gruppe setzt den „continuous ranked probability score“ (CRPS) ein, ein mathematisch-statistisch fundiertes Gütemaß, mit dem die CST-Gruppe arbeitet.

„Über ein Jahr lang haben wir unsere Ideen gemeinsam weiterentwickelt“, erinnert sich Sebastian Lerch. Beim Bau des neuronalen Netzes übernahm er die Ansätze der AIN-Kollegen. Die Grundidee der späteren Publikation war im Fachgebiet bis dahin unbekannt. Auch deshalb ist die in der „Monthly Weather Review“ publizierte Arbeit eine der meistgelesenen aktuellen Veröffentlichungen dieser führenden Fachzeitschrift.

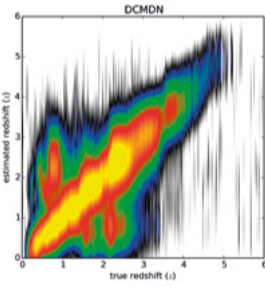
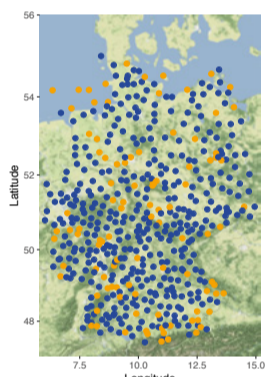
„Wir haben mit den Kollegen der CST intensiv über die Vorhersagequalität von maschinellen Lernsystemen diskutiert“, berichtet AIN-Gruppenleiter Kai Polsterer. „Es kristallisierte sich heraus, dass der CRPS eine gute Lösung sein könnte – und das war auch so.“ Durch die neue Methode können Astronomen jetzt die Rotverschiebung, ein kosmologisches Maß für Entfernung und somit auch für das Alter, für alle Himmelsobjekte vorhersagen, egal ob es sich um Sterne, Galaxien oder Quasare handelt.

„Die räumliche Nähe und mögliche Treffpunkte wie die Cafébar im HITS waren sehr hilfreich für unsere Arbeit“, betont Sebastian Lerch, der inzwischen am KIT eine eigene Forschungsgruppe leitet. Und Kai Polsterer ergänzt: „Die familiäre Atmosphäre und die Offenheit gegenüber anderen Fächern spielen der Interdisziplinarität in die Karten.“

Rasp, S. and S. Lerch: *Neural networks for post-processing ensemble weather forecasts*, *Mon. Weather Rev.*, Vol. 146, Nov. 2018.

DOI: [10.1175/mwr-d-18-0187.1](https://doi.org/10.1175/mwr-d-18-0187.1)

D'Isanto, A. and K.L. Polsterer: *Photometric redshift via deep learning*, *Astronomy & Astrophysics*, Vol. 609, Jan. 2018. DOI: [10.1051/0004-6361/201731326](https://doi.org/10.1051/0004-6361/201731326).



FORSCHUNG

## Wolfgang Müller: „Wir denken über Fachgrenzen hinaus.“

Es war ein neues Gebiet, das Wolfgang Müller betrat, als er vor knapp zehn Jahren die Leitung der Gruppe „Scientific Databases and Visualization“ (SDBV) übernahm. „Mit biologischen Prozessen hatte ich bis dahin kaum Berührungspunkte“, erinnert sich der Diplomphysiker und habilitierte Informatiker. Er hatte jedoch breite Erfahrung mit effizienten, interaktiven Suchmethoden auf komplexen Daten wie Bildern gesammelt. Spannend fand er es, nun mit „echten“ Nutzern anstatt mit hypothetischen Nutzungs-Szenarien zu arbeiten.

Theorie, Experiment und Praxis spielten in Wolfgang Müllers Werdegang gleichberechtigte Rollen: Seine Physikdiplomarbeit schrieb er über platzende Bläschen in Seifenschaum, sein Informatikdiplom erwarb er mit einer Arbeit über Data Mining. 2001 promovierte er an der Universität Genf zu inhaltsbasierter Bildsuche und habilitierte sich schließlich 2008 an der Universität Bamberg. Danach arbeitete er bei „Freiheit.com“ in Hamburg als Entwickler zusammen mit Kollegen für einen großen Kunden am Relaunch einer Webseite, die noch heute Millionen Menschen nutzen.

Sein interdisziplinäres Profil passte gut zur SDBV-Gruppe. Hier arbeiten praxiserfahrene Biologinnen, Biochemiker und Chemiker gemeinsam mit Software-Entwicklerinnen und -entwicklern an der Integration von Daten für die Lebenswissenschaften.

Wesentliche Erfolge sind die Reaktionskinetik-Datenbank SABIO-RK und das Datenmanagement in nationalen und internationalen Forschungsprojekten und -initiativen wie de.NBI, LiSyM, FAIRDOM und MESI-STRAT. Aufgrund der langjährigen Erfahrung der HITS-Datenbankspezialisten entstand neben SABIO-RK die Datenmanagement-Plattform SEEK, als Teil des transnationalen FAIRDOM-Projekts. „Wir wollen erreichen, dass Nutzerinnen und Nutzer ihre Daten nach dem FAIR-Prinzip austauschen“, so Wolfgang Müller, „das heißt, die Daten sollen Findable, Accessible, Interoperable und Reusable sein.“

Seine Gruppe setzt sich außerdem für Datenstandards in der Forschung ein. Sie ist aktiv im Netzwerk COMBINE (Computational Modeling in Biology Network). Diese Initiative entwickelt Standards und Formate für die Systembiologie, die synthetische Biologie und verwandte Fächer, die die Zusammenarbeit von Forschern und die Vergleichbarkeit von Daten verbessern sollen. Das HITS ist Gastgeber des 10. COMBINE-Meetings, zu dem sich vom 15. bis 19. Juli 2019 führende Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler sowie Mitglieder von Organisationen wie ISO und DIN treffen (siehe „HITS“).

Der sprichwörtliche Blick über den Tellerrand hilft Wolfgang Müller auch in seiner Funktion als HITS-Institutssprecher und Prokurist, die er seit Beginn des Jahres turnusgemäß zwei Jahre lang ausübt. „Wir denken zunehmend über Fachgrenzen hinaus“, sagt der 49-Jährige. Er beobachtet eine steigende Zahl interdisziplinärer Projekte und Publikationen der HITS-Forschungsgruppen. „Das können wir sicher noch steigern – gemäß unserem Motto: 'Think beyond the limits!'.“

Impressum | Dr. Peter Saueressig (V.i.S.d.P.), [saueressig@h-its.org](mailto:saueressig@h-its.org), Tel. +49 6221 533 245

Bildnachweise: HITS, S. Lerch, A. D'Isanto, COMBINE network, G. Keskin | [www.h-its.org](http://www.h-its.org)

PORTRAIT

NO 35 / 07-2019

THE CHARTS

Heidelberg Institute for Theoretical Studies

