



Neues aus dem MATHEON

DFG-Forschungszentrum MATHEON - Mathematik für Schlüsseltechnologien

Aktuell

Große Mathematik-Schau

Anlässlich der Überreichung der Urkunde für das MATHEON als Ort im Land der Ideen findet am 30. November 2007 im Audimax der TU Berlin eine große Mathematik-Schau statt.

Mehr Informationen auf Seite 3

Deutschland
Land der Ideen



Neue Webpage

Endlich geschafft! Das MATHEON hat eine vollkommen neu gestaltete Internetseite. Der neue Internetauftritt hat jetzt ein einheitliches Layout und ist sehr viel übersichtlicher gestaltet als die alte Seite. Wer schon einmal an der Um- oder Neugestaltung einer Website mitgewirkt hat weiß es: Der Teufel steckt im Detail. Natürlich arbeiten wir weiter an der Verbesserung der Seite und sind für Kritik und Anregungen dankbar. Die Seite ist weiterhin unter der bekannten Adresse www.matheon.de zu erreichen.



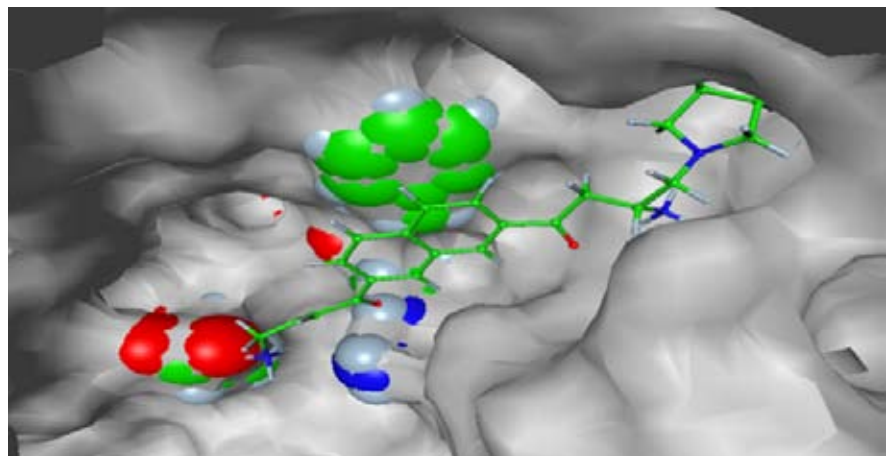
Vom Dietrich zum Sicherheitsschlüssel

Mathematiker des MATHEON simulieren neuen Wirkstoff für die Diabetes-Behandlung

Diabetes ist eine Volkskrankheit, vor allem die Zahl der so genannten Typ 2-Diabetiker steigt mit zunehmendem Alter, neue medikamentöse Therapie-Ansätze scheitern bisher an erheblichen Nebenwirkungen. Deshalb ist man weltweit auf der Suche nach wirkungsvolleren und unschädlicheren Medikamenten. Dr. Marcus Weber, Mathematiker am DFG-Forschungszentrum MATHEON, ist es jetzt gemeinsam mit Alexander Bujotzek gelungen, einen Wirkstoff zu simulieren, der hier eine optimale Lösung verspricht. Allerdings fehlt den beiden Forschern noch ein industrieller Partner, der die Synthesierung des bisher nur im Computer existierenden Wirkstoffes finanzieren könnte.

genentleerung verlangsamen, das Hungergefühl reduzieren und so den Zuckerhaushalt regeln. Das körpereigene Enzym Dipeptidylpeptidase 4 (DPP4) baut diese Inkretine jedoch schon nach kürzester Zeit ab und verhindert somit deren positive Wirkung auf den Zuckerhaushalt.

Die Arbeitsgruppe „Computational Drug Design“ am Zuse-Institut in Berlin hat sich nun eine Reihe bereits in der Forschung befindlicher DPP4-Inhibitoren angeschaut und im Computer simuliert. Dabei wurde auch ein Wirkstoff untersucht, der bereits in der Röntgenstrukturanalyse große Unsicherheiten aufwies und dessen Bindungsverhalten deshalb nicht



Im Magen-Darm-Trakt jedes Menschen befinden sich Inkretine, die einerseits die Insulinausschüttung und die Insulinsynthese positiv beeinflussen, andererseits die Ma-

genau bekannt war. „Wir haben entdeckt, dass dieser Wirkstoff zwar mit der Schnauze an das DPP4 andockte, aber wie ein freundlicher Hund mit seinem Schwanz wedelte. Dieses We-



Dr. Marcus Weber

Seit 2006 Leiter der Forschungsgruppe „Computational Drug Design“

2006 Dissertation in Mathematik, Freie Universität Berlin

2001-2006 Wissenschaftlicher Mitarbeiter, Zuse Institut Berlin

1999-2001 Systemberater, TEAM GmbH, Paderborn

1999 Betriebspraktikum im Bereich Produktionsplanung, Saertex GmbH & Co. KG, Saerbeck

1999 Diplom Mathematik, Westfälische Wilhelms-Universität Münster

1993-1999 Student der Mathematik, Westfälische Wilhelms-Universität Münster, Chemie als Nebenfach

1992-1993 Student der Chemie, Westfälische Wilhelms-Universität Münster



Alexander Christian Bujotzek

Seit September 2006 Studentische Hilfskraft in der Gruppe „Computational Drug Design“

2006 – heute Student der Bioinformatik (Master), FU Berlin; voraussichtlicher Abschluss im Sommer 2008

2003 - 2006 Student der Bioinformatik (Bachelor), FU Berlin

deln zeigte an, dass dieser Wirkstoff noch nicht spezifisch genug für die DPP4 war. Der Wirkstoff war also wie ein simpler Dietrich, der viele Türen öffnen und verschließen konnte. „Wir aber suchten ja den Sicherheitsschlüssel, der nur für ein ganz bestimmtes Schlüsselloch passt“, schildert Marcus Weber. Also versuchten er und Alexander Bujotzek, dieses lose Ende durch eine große Gruppe zu ersetzen, die genau auf die DPP4 passen und so den „Schwanz“ zur Ruhe zu bringen sollte.

Simulation gelungen

Diese Umstrukturierung des Wirkstoffes ist den beiden Wissenschaftlern nun in der Simulation gelungen. Auch eine ursprünglich „ungünstige Chemie“ des Wirkstoffes konnte gemeinsam mit dem Chemiker Jörg Rademann vom Leibniz-Institut für Molekulare Pharmakologie in Berlin-Buch beseitigt werden. Gleichzeitig hat Marcus Weber ein mathematisches Modell entwickelt, mit dem er die Wirksamkeit eines Wirkstoffes am Computer einschätzen und feststellen kann, ob und wenn ja welche unwirksamen Teile es gibt. Ebenso kann mit der Simulation die Wirkungsweise des Stoffes bildlich dargestellt werden.

„Damit können wir nun wichtige Designvorgaben zur gezielten Entwicklung spezifischer Wirkstoffmoleküle machen und diese Vorgaben auch überprüfen“, ist sich Marcus Weber sicher. Jetzt allerdings müsste der Wirkstoff aus dem Computer in die Wirklichkeit transportiert, also tatsächlich hergestellt und dann klinisch getestet werden. „Doch dazu“, so der Mathematiker, „fehlt vor allem eine finanzielle Unterstützung von der Industrie“.

Weitere Informationen erhalten Sie bei:

Dr. Marcus Weber
Tel.: +49 (0)30 84185-189
Email: weber@zib.de
www.zib.de/weber/

Vom Text zur Skulptur

Als sich im letzten Jahr auf Einladung der Wirtschaftsförderung des Bezirkes Charlottenburg-Wilmersdorf Gewerbetreibende am MATHEON trafen, war auch Joachim Weinhold aus dem Bereich Ästhetische Praxis an der Fakultät Gestaltung der Universität der Künste am MATHEON und war begeistert vom 3D-Labor und dessen Tätigkeitsfeld. Weinhold selbst experimentiert mit neuen darstellenden Formen, die sich erst mittels des Computers verwirklichen lassen. „Wir wollen die Formen von Dingen analysieren, die ursprünglich als Form gar nicht vorhanden sind“, sagt Weinhold. Das 3D-Labor war hierfür der richtige Ansprechpartner, und es ergab sich schnell eine fruchtbare Kooperation.

In einem längeren Prozess wurde ein Projekt definiert, in das die Vorstellungen beider Seiten einfließen. Man entwickelte gemeinsam ein Konzept für ein Computerprogramm, mit dem geschriebene Texte erfasst, analysiert und in darstellbare Formen umgesetzt werden können. Im Rahmen der Veranstaltung INNOVATION HABITAT Berlin-Charlottenburg, die vom 7. bis 13. Oktober rund um den Ernst-Reuter-Platz stattfand, wurden erste Ergebnisse gezeigt. Exemplarisch wurde die Struktur verschiedener Texte durch die zu diesem Zeitpunkt aktuellen algorithmischen Verfahren offen gelegt. Die daraus künstlerisch entwickelten Gebilde wurden als virtuelle Visualisierungen und als reale Objekte präsentiert. Praktisch bedeutet dies, dass die Besucher einen beliebigen Text, vom Schillergedicht bis zur Bedienungsanleitung für Staubsauger, in den Computer eingeben konnten, der dann daraus live eine Einbettung in den dreidimensionalen Raum generierte und darstellte.

Unter http://www.math.tu-berlin.de/3dlabor/new_morphology/new_morphology_w.html können Sie sich von der kreativen Gestaltung Ihrer ausgewählten Texte selbst überzeugen.

Neue MATHEON-Professoren

Prof. Dr. Reinhold Schneider

Seine wichtigsten Werkzeuge sind leistungsstarke Computer, sein Arbeitsgebiet sind numerische Simulationen - Reinhold Schneider ist Professor für Scientific Computing und seit Oktober Professor am MATHEON. Reinhold Schneider kam von der Christian-Albrechts-Universität zu Kiel nach Berlin. Schneider studierte Mathematik an der Technischen Hochschule Darmstadt. Promotion und Habilitation erfolgten ebenfalls dort. Nach Lehrstuhlvertretungen in Numerik an der Universität Gesamthochschule Essen und der RWTH Aachen übernahm er 1996 eine Professur für Numerische Mathematik an der TU Chemnitz. 2003 wechselte er nach Kiel.

Die numerische Mathematik ist eine Nahtstelle für viele Wissenschaften. Sie benötigt Kenntnisse der Mathematik und nutzt die Möglichkeiten von Hard- und Software, um Probleme, zum Beispiel in der Klimafor-

Prof. Dr. Martin Skutella

Auch Martin Skutella ist neuer Professor am MATHEON für das Arbeitsgebiet „Kombinatorische Optimierung und Graphenalgorithmen“. Prof. Martin Skutella studierte von 1990 bis 1995 Mathematik und Physik an der Rheinisch-Westfälischen Technischen Hochschule Aachen. Anschließend arbeitete er bis 1998 als Wissenschaftlicher Mitarbeiter an der TU Berlin. Hier promovierte er 1998 mit Auszeichnung. Es folgten eine Tätigkeit am Center for Operations Research and Econometrics, Louvain-la-Neuve in Belgien, anschließend eine Vertretungsprofessur an der Universität Bonn. Zwischen 2000 und 2002 war er als Wissenschaftlicher Assistent an der Technischen Universität Berlin tätig und habilitierte sich im Jahr 2002. Es folgten zwischen 2003 und 2004 eine Gastprofessur am MIT, Cambridge, in den USA und eine Forschungsprofessur am Max-Planck-Institut für Informatik in Saarbrücken.



Reinhold Schneider Martin Skutella

Mathematik-Schau mit buntem Programm

Mathematik ist kreativ, Mathematik ist spannend, Mathematik ist vielseitig. Mathematik ist Zukunft. Ohne Mathematik wären die modernen Schlüsseltechnologien undenkbar, wir würden nicht auf den Mond fliegen, sondern noch hinter'm Mond leben. Im Zentrum dieser mathematischen Gegenwart und Zukunft steht das Berliner DFG-Forschungszentrum MATHEON als weltweit anerkanntes Exzellenzzentrum für Angewandte Mathematik. Im Jahr 2007 wurde das MATHEON wegen seiner projektbezogenen Forschung zum Ort im Land der Ideen gekürt. Anlass genug, um sich einer breiten Öffentlichkeit darzustellen. Deshalb lädt das MATHEON zu einer munteren und abwechslungsreichen „Schau“ ein: Viel Unterhaltung, keine Formeln, aber trotzdem faszinierende Mathematik.



Ein zweiter Anlass zu feiern ist der Digitale Adventskalender, ein äußerst erfolgreiches Projekt des MATHEON für Schülerinnen und Schüler. Er öffnet in diesem Jahr ab dem 1. Dezember schon zum fünften Mal seine Türchen im Internet und lockt mit vielen schönen Preisen nicht nur Schülerinnen und Schüler, sondern Mathematikbegeisterte jeden Alters.

Die „Mathematik-Schau“ wird ganz im Zeichen dieses Adventskalenders stehen und den Auftakt für den diesjährigen Mathespaß bilden. 24 Türchen mit ganz unterschiedlichem Inhalt werden sich im Beisein der Bundesministerin für Bildung und Forschung, Dr. Annette Schavan, und Berlins Wissenschaftssenator Dr. Jürgen Zöllner öffnen. Es erwarten Sie 3D-Vorführungen, Musik, Filme, ein Quiz und kleine Gewinne. Aber weil es ein Adventskalender ist, verraten wir die einzelnen Programmpunkte

an dieser Stelle noch nicht. Als Moderator und Türöffner wird Sie Ulrich Blumenthal, Wissenschaftsjournalist beim Deutschlandfunk, begrüßen und durch das Programm führen.

Lassen Sie sich überraschen! Bringen Sie Ihre Familie, Freunde und Verwandte mit.

Die „Mathematik-Schau“ des DFG-Forschungszentrums MATHEON anlässlich der Überreichung der Urkunde zum Ort im Land der Ideen und als Auftakt zum „Digitalen Adventskalender“ findet statt am

Freitag, 30. November 2007
17:45 bis 20:00 Uhr (Einlass 17:30)
Technische Universität Berlin
Audimax im Hauptgebäude
Straße des 17. Juni 135
10623 Berlin

Die Veranstaltung wird auch unter www.matheon.de live im Internet übertragen.

MATHEON-Mitarbeiter für Lebersegmentierung ausgezeichnet

„Weltmeister“ in der Lebersegmentierung wurden Hans Lamecker und Dagmar Kainmueller vom MATHEON gemeinsam mit Thomas Lange, Mathematiker bei Prof. Peter M. Schlag an der Charité. Für ihre Arbeit zur leichteren und fehlerfreieren präoperative Segmentierung schnitten sie bei einem von der „10th International Conference on Medical Image Computing and Computer Assisted Intervention (MICCAI)“ ausgeschriebenen Wettbewerb in Australien als Bestes unter 44 internationalen Teams ab. Präoperative Segmentierungen sind für eine computergestützte Operation unerlässlich. Sie bilden die Voraussetzung für einen zielgenauen und erfolgreichen Eingriff. Die Juroren waren besonders von der hohen und bisher bei einer automatischen Segmentierung noch nie erreichten Genauigkeit beeindruckt. (Mehr im nächsten Newsletter).

Veranstaltungen in Berlin

12. November 2007 um 16:15 Uhr:
Kolloquium Mathematik und ihre Didaktik
Prof. Dr. Stefan Halverscheid (Universität
Bremen)

Mathematik in Billardspielen

HU Berlin

Institut für Mathematik und ihre Didaktik
Unter den Linden 6, 10099 Berlin
Raum 2014 A

13. November 2007 um 09:30 Uhr:
Forschungsseminar Algebraische Geometrie

Prof. G. Farkas, Prof. J. Kramer
Filippo Viviani (HU Berlin)

Cohomological support loci for the ideal of an Abel-Prym curve

HU Berlin

Institut für Mathematik
Rudower Chaussee 25, 12489 Berlin
Raum 3.006, Haus 3, EG

19. November 2007 um 14:15 Uhr:
Oberseminar Numerische Mathematik/
Scientific Computing
Michael Griebel, Universität Bonn
**A Sparse Grid Space-Time Discretization
Scheme for Parabolic Problems**

Institut für Mathematik
Arnimallee 6, 14195 Berlin
Raum 032, EG

20. November 2007 um 17:00 Uhr:
Dr. Brigitte Lutz-Westphal, TU Berlin
**Kombinatorische Optimierung in Unter-
richt und Lehre - Anregungen zur authen-
tischen Vermittlung von Mathematik**

Universität Potsdam, Institut für Mathematik
Am Neuen Palais 10, 14469 Potsdam
Raum 0.59, Haus 8

27. November 2007 um 16:00 Uhr:
Statistische Methoden in der empirischen
Forschung
Dahms(FU), Kaufmann (Bayer Schering
Pharma AG), Martus (Charité), Meister
(TFH), Müller-Graf (BfR), Richter (HU),
Schaffrath Rosario (RKI), Wierich (Parexel),
Hauschke (Konstanz)
Planung und Auswertung von Bioäquivalenzstudien: „State of the Art“

HU Berlin

Landwirtschaftlich-Gärtnerische Fakultät
Invalidenstr. 42, 10115 Berlin
Hörsaal 2, 2. Etage

Mitmach-Mathematik: MATHEON und Exploratorium kooperieren

Mehr als 90.000 Besucher hatte die wissenschaftliche Mitmach-Welt „Exploratorium“ in Potsdam bereits im ersten Jahr ihres Bestehens. Bereits ab dem Vorschulalter sollen Kinder im Exploratorium sehen, dass Physik ohne Mathematik ebenso wenig funktioniert wie Biologie ohne Chemie. „Mittlerweile kommen unsere Ausstellungsstücke bei Erwachsenen genau so gut an wie bei den Kindern“, sagt der Leiter der Einrichtung, der Physiker Dr. Axel Werner. Mehr als 100 interaktive Ausstellungsstücke aus vielen Bereichen der Naturwissenschaft und Technik haben die sieben Gründer des gemeinnützigen Vereins hergestellt. Ab nächstem Jahr werden es einige mehr sein, denn das MATHEON hat mit dem Exploratorium eine Kooperation vereinbart. Ziel ist es, zum Jahr der Mathematik 2008 etwa zehn interaktive Ausstellungsstücke zu



bauen, die spannende Probleme und Lösungen aus der Mathematik anbieten. Die Ideen dazu kommen vom MATHEON, die handwerkliche Umsetzung und die Betreuung leistet das Exploratorium.

Schon jetzt lohnt sich ein Besuch. Es ist erstaunlich, welche Kreativität und welchen Einfallsreichtum die Macher an den Tag legen. Da verwundert es nicht, dass man nur in leuchtende Kinderaugen blickt und auch die Erwachsenen mit viel Spaß Versuche unternehmen und sich auf einem Fahrrad abstrampeln, um eine Lampe zum Leuchten zu bringen.

<http://www.exploratorium-potsdam.de/index.htm>

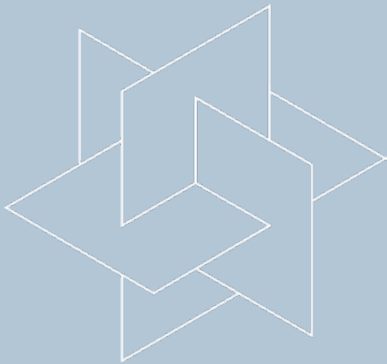
Medienpreis des MATHEON verliehen

Es war ein kleiner, festlicher Rahmen, in dem am 1. November gemeinsam mit der Berliner Journalistenschule die Preisträger des diesjährigen MATHEON-Medienpreises geehrt wurden. Begonnen hatte der Abend in den Räumen in der 1. Etage des Restaurants Bocca di Bacco mit einer Diskussion zum



Prof. Peter Deuflhard, Uta Deffke, Dirk Schneider, Claas Michalik (von links)

Thema „Mathematik, Medien und Missverständnisse“. Moderiert von Sven Felix Kellerhoff, Leitender Redakteur bei der Welt, und unter reger Beteiligung des Publikums diskutierten der Mathematiker und Journalist Andreas Loos und der MATHEON-Pressesprecher Rudolf Kellermann. Im Anschluss daran verlieh Juryvorsitzender, MATHEON-Mitbegründer und Präsident des Zuse-Zentrums, Prof. Peter Deuflhard, die drei Preise. Den mit 1.500 Euro dotierten 1. Preis erhält Dirk Schneider aus Münster für sein Portrait des britischen Risikomatematikers Gordon Woo, der unter dem Titel „Das Orakel von London“ im Zeit Wissen Magazin erschienen ist. 1.000 Euro bekommt Uta Deffke aus Berlin für den 2. Platz und ihren Artikel „Ehre, wem Ehre gebührt“, der sich mit mathematischen Methoden beschäftigt, mit denen die Echtheit von Gemälden festgestellt werden kann. Der 3. Preis und damit 500 Euro wurden Claas Michalik aus Aachen für seinen Artikel „Bei der Echtzeitoptimierung sitzt die Zeit im Nacken“ zugesprochen.



Zentrale Geschäftsstelle

Claudia Ewel
Andy Marquardt

Technische Universität Berlin
Sekretariat MA 3-1
Straße des 17. Juni 136
10623 Berlin

Tel.: +49 (0)30 314-28478
Fax: +49 (0)30 314-29260

Email: zentrale@matheon.de
http://www.matheon.de

Presse- und Öffentlichkeitsarbeit

Rudolf Kellermann
Tel.: +49 (0)30 314-29274
Email: kellermann@matheon.de

Technologietransfer

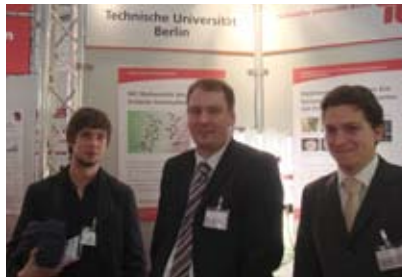
Dr. Michael Schmidt
Tel.: +49 (0)30 314-29275
Email: schmidt@matheon.de

Schulkontakte

Katja Biermann
Tel.: +49 (0)30 314-29759
Email: biermann@matheon.de

MATHEON stellte sich auf BIOTECHNICA vor

Erstmals war das MATHEON in diesem Jahr am Gemeinschaftsstand der Berlin Partner GmbH auf der BIOTECHNICA in Hannover beteiligt. Vertreten war das MATHEON durch Valentin Ziegler mit neuen Methoden für das „Virtuelle Screening von Wirkstoffen“ und durch Dr. Marcus



Alexander Bujotzek, Dr. Marcus Weber, Valentin Ziegler (von links)

Weber mit konkreten Ergebnissen im Bereich „Rechnergestützte Entwicklung von Medikamenten“. Begleitet wurden die Wissenschaftler vom Transferbeauftragten des MATHEON, Dr. Michael Schmidt. Beide Entwicklungen sind inzwischen so weit, dass ein weiterer Schritt in Richtung industrieller Nutzung in Kooperationen mit Pharma-Unternehmen gegangen werden soll.

Valentin Ziegler stellte vielversprechende neue Methoden zum Finden von 3D-Struktur-Analoga in grossen Molekül-Datenbanken aus der Gruppe des MATHEON-Forschers Prof. Stefan Hougardy vor. Gemeinsam mit der Charité wurden neue Data-Mining-Algorithmen entwickelt, die eine schnellere Suche nach Übereinstimmungen von funktionellen Substrukturen ermöglichen. Diese Forschungsergebnisse wurden vor kurzem zum Patent angemeldet.

„Obwohl bei der Messe eher Ausrüster als Leute aus der Forschung und Entwicklung anzutreffen waren, konnten wir einige gute Gespräche führen“, meinte Michael Schmidt. Wichtig sei vor allem gewesen, Anregungen für künftige Forschungen zu bekommen und „neue Branchentrends“ zu erkennen, sagte Schmidt.

Auszeichnungen

Wie im Vorjahr gehen zwei der vier Dissertationspreise der *Gesellschaft für Operations Research (GOR)* an MATHEON-Mitglieder. Ausgezeichnet werden Andreas Bley (Mitarbeiter im Projekt B3) und Nicole Megow (Mitarbeiterin im Projekt B13) für Ihre Dissertationen an der TU Berlin. Timo Berthold (Mitarbeiter im Projekt B12) erhält darüber hinaus den Diplomarbeitspreis der GOR. Die Auszeichnungen wurden am 5. September auf der internationalen Konferenz *Operations Research 2007* in Saarbrücken übergeben.



Andreas Bley (ZIB)



Nicole Megow (TU)



Timo Berthold (ZIB)



Tatjana Stykel

Richard-von-Mises-Preis für Tatjana Stykel

Für Ihre Forschungen zur Modellreduktion in Differential-algebraischen Gleichungen hat Tatjana Stykel vom MATHEON den diesjährigen Richard-Mises-Preis der *Gesellschaft für Angewandte Mathematik und Mechanik (GAMM)* erhalten. Tatjana Stykel studierte Mathematik zunächst an der Universität von Novosibirsk, dann an der Humboldt-Universität zu Berlin und der Universität Chemnitz. Bei Prof. Volker Mehrmann an der TU Berlin schloss sie 2002 mit PhD ab. Nach einem Postdoc-Jahr an der Universität von Calgary in Kanada arbeitet sie seit 2003 in der Arbeitsgruppe „Scientific Computing“ am MATHEON.