

Dr. Clemens Gröpl



| | |
|---------------|--|
| Anschrift | Borussiastraße 7-9 Aufgang II 12103 Berlin |
| Geboren | am 13.09.1968 in Mannheim |
| Familienstand | geschieden, keine Kinder |
| Telefon | Mobil: +49 176 49 53 74 71 Festnetz: +49 30 75 44 74 77 |
| Email | clemens.groepl@gmail.com |
| WWW | www.alice-dsl.net/clemens.groepl/ |

Lebenslauf

Schulausbildung

- 9.1974 – 8.1978 Grundschule in Beindersheim (Pfalz)
9.1978 – 6.1987 Albert-Einstein-Gymnasium in Frankenthal (Pfalz)

Zivildienst

- 10.1987 – 5.1989 in der „Lebensgemeinschaft Bingenheim für Seelenpflege-bedürftige Menschen“
(Arbeit mit geistig Behinderten)

Studium

- 4.1989 – 9.1990 Diplom-Mathematik an der Universität Marburg
Nebenfach: Philosophie
ab 10.1990 Fortsetzung Diplom-Mathematik an der Universität Bonn
12.1994 Umzug nach Berlin, Fortsetzung der Diplomarbeit
7.1995 – 3.1996 Studentische Hilfskraft im Projekt „Effiziente Algorithmen zur formalen Verifikation
von VLSI-Designs“ bei Dr. Anand Srivastav (jetzt Prof., Universität Kiel) und Prof.
Hans-Jürgen Prömel, Humboldt-Universität zu Berlin (jetzt Präsident der Universität
Darmstadt)
3.1996 Diplom Mathematik. Note: sehr gut

Promotion

- 4.1996 – 11.1998 Promotionstipendiat im Graduiertenkolleg „Algorithmische Diskrete Mathematik“
bei Prof. Prömel, Humboldt-Universität zu Berlin
1.1998 – 2.1998 Werkstudent bei der IBM Deutschland Entwicklung GmbH in Böblingen.
Das Stipendium wurde für diese Zeit unterbrochen.
12.1998 Abgabe der Dissertationsschrift „Binary Decision Diagrams for Random Boolean
Functions“
5.1999 Promotion zum Dr. rer. nat. Note: magna cum laude

Postdoc

- 3.1999 – 2.2003 Wissenschaftlicher Mitarbeiter im DFG-Projekt „Approximative, randomisierte und
probabilistische Algorithmen für kombinatorische Optimierungsprobleme“ bei Prof.
Hans-Jürgen Prömel, Humboldt-Universität zu Berlin
3.2003 – 9.2005 Wissenschaftlicher Mitarbeiter in der Arbeitsgruppe Algorithmische Bioinformatik
bei Prof. Knut Reinert, Freie Universität Berlin.
Beginn der Arbeiten an [OpenMS](#), einer open-source Software zur Analyse von
Flüssigkeitschromatographie-Massenspektrometrie (LC-MS) Daten in der Proteomik
10.2005 – 3.2006 Vertretung der Professur Bioinformatik an der Universität Halle

- 4.2006 – 3.2009 Wissenschaftlicher Mitarbeiter in der Arbeitsgruppe Algorithmische Bioinformatik bei Prof. Knut Reinert, Freie Universität Berlin
- 7.2008 Abgabe der Habilitationsschrift „Untersuchungen zum Steinerbaumproblem in Graphen, zur Enumeration zufälliger planarer Graphen, und zu Algorithmen in der massenspektrometrie-basierten Proteomik“
- 12.2009 Habilitation. Fachgebiet: Mathematik und Informatik
- 4.2009 – 2.2010 Vertretung der Professur Bioinformatik an der Universität Greifswald

Lehrveranstaltungen und Publikationen

Seit 10.1999 habe ich ständig Vorlesungen und Übungen konzipiert und abgehalten über Themen aus den Bereichen: Automaten und formale Sprachen, Algorithmen und Datenstrukturen, Effiziente Algorithmen und Datenstrukturen, Graphentheorie, Kombinatorik und Diskrete Mathematik, Algorithmische Bioinformatik, Programmieren in C++. Für die Details hierzu verweise ich auf meine [Webseite](#). Dort sind außerdem die meisten meiner [Publikationen](#) als PDF-Dateien einzusehen.

Bioinformatik

Ab 2003 habe ich vor allem im Bereich der Bioinformatik geforscht. Dabei habe ich insbesondere an der Auswertung von experimentellen Daten gearbeitet, die aus der Koppelung von Flüssigkeitschromatographie mit Massenspektrometrie stammen, wie sie in der Proteomforschung üblich ist (OpenMS Projekt). In der Lehre bildeten daneben Methoden zum Vergleich von (und schnellen Suche in) Zeichenketten (DNA etc.) einen weiteren Schwerpunkt. Natürlich habe ich bei internationalen Konferenzen und Vorträgen in Berlin viele weitere Teilgebiete kennen gelernt.

Professionelle Softwareentwicklung

Die Entwicklung von Software war immer ein wesentlicher Teil meiner Arbeit. An der Freien Universität Berlin habe ich seit 2003 das open-source Projekt OpenMS (www.openms.de, sourceforge.net/projects/open-ms) maßgeblich mitaufgebaut und war zuletzt Maintainer von ca. einhundert Klassen. OpenMS ist eine zur Weiterverbreitung bestimmte C++-Bibliothek. Daher haben wir von Anfang an besonderen Wert auf Strukturierung, effizienten Umgang mit Ressourcen und Stabilität gelegt. Dazu gehören u. a. der Einsatz von Design Patterns, generische Programmierung mit C++-Templates und automatisierte Tests. Das OpenMS Team umfasst heute über ein Dutzend Entwickler an verschiedenen Standorten. – Auch bei den Untersuchungen zu planaren Graphen war ich derjenige Koautor, der die Programme schrieb.

Angestrebte Position

Softwareentwicklung · Algorithmen · C++ · Bioinformatik · Lebenswissenschaften

Berlin, 4. März 2010

Publikationen

Die Sortierung erfolgt nach Jahreszahl rückwärts, dann Namen der Autoren. Die aktuelle Publikationsliste mit PDF-Dateien zum Download kann gibt es auch unter www.alice-dsl.net/clemens.groeppl/publications im Web.

- [1] Manuel Bodirsky, Clemens Gröpl, and Mihyun Kang. Generating unlabeled connected cubic planar graphs uniformly at random. *Random Structures and Algorithms*, 32(2):157–180, 2008. doi:10.1002/rsa.20206.
- [2] Clemens Gröpl. Untersuchungen zum Steinerbaumproblem in Graphen, zur Enumeration zufälliger planarer Graphen, und zu Algorithmen in der massenspektrometrie-basierten Proteomik (Habilitationsschrift), 2008.
- [3] Eva Lange, Ralf Tautenhahn, Steffen Neumann, and Clemens Gröpl. Critical assessment of alignment procedures for LC-MS proteomics and metabolomic measurements. *BMC Bioinformatics*, 9(375), 2008. doi:10.1186/1471-2105-9-375.
- [4] Ole Schulz-Trieglaff, Rene Hussong, Clemens Gröpl, Andreas Leinenbach, Andreas Hildebrandt, Christian Huber, and Knut Reinert. Computational quantification of peptides from LC-MS data. *Journal of Computational Biology*, 15(7):685–704, 2008. doi:10.1089/cmb.2007.0117.
- [5] Ole Schulz-Trieglaff, Nico Pfeifer, Clemens Gröpl, Oliver Kohlbacher, and Knut Reinert. LC-MSsim - a simulation software for liquid chromatography mass spectrometry data. *BMC Bioinformatics*, 9(423), 2008. doi:10.1186/1471-2105-9-423.
- [6] Marc Sturm, Andreas Bertsch, Clemens Gröpl, Andreas Hildebrandt, Rene Hussong, Eva Lange, Nico Pfeifer, Ole Schulz-Trieglaff, Alexandra Zerck, Knut Reinert, and Oliver Kohlbacher. OpenMS - an open-source software framework for mass spectrometry. *BMC Bioinformatics*, 9(163), 2008. doi:10.1186/1471-2105-9-163.
- [7] Manuel Bodirsky, Clemens Gröpl, Daniel Johannsen, and Mihyun Kang. A direct decomposition of 3-connected planar graphs. *Séminaire Lotharingien de Combinatoire*, B54Ak:15 pages, 2007.
- [8] Manuel Bodirsky, Clemens Gröpl, and Mihyun Kang. Generating labeled planar graphs uniformly at random. *Theoretical Computer Science*, 379(3):377–386, 2007.
- [9] Eva Lange, Clemens Gröpl, Ole Schulz-Trieglaff, Andreas Leinenbach, Christian Huber, and Knut Reinert. A geometric approach for the alignment of liquid chromatography-mass spectrometry data. In *Proceedings of the 15th Annual International Conference on Intelligent Systems for Molecular Biology (ISMB) & 6th European Conference on Computational Biology (ECCB)*. 2007.
- [10] Ole Schulz-Trieglaff, Rene Hussong, Clemens Gröpl, Andreas Hildebrandt, and Knut Reinert. A fast and accurate algorithm for the quantification of peptides from mass spectrometry data. In *Proceedings of the Eleventh Annual International Conference on Research in Computational Molecular Biology (RECOMB 2007)*, pages 473–487. 2007.
- [11] Oliver Kohlbacher, Knut Reinert, Clemens Gröpl, Eva Lange, Nico Pfeiffer, Ole Schulz-Trieglaff, and Marc Sturm. TOPP - The OpenMS Proteomics Pipeline. In *Proceedings of the 5th European Conference on Computational Biology (ECCB 2006)*. 2006.
- [12] Eva Lange, Clemens Gröpl, Knut Reinert, Oliver Kohlbacher, and Andreas Hildebrandt. High accuracy peak-picking of proteomics data using wavelet techniques. In *Proceedings of the 11th Pacific Symposium on Biocomputing (PSB06)*, pages 243–254. 2006.

- [13] Bettina Mayr, Oliver Kohlbacher, Knut Reinert, Marc Sturm, Clemens Gröpl, Eva Lange, Christoph Klein, and Christian Huber. Absolute myoglobin quantitation in serum by combining two-dimensional liquid chromatography-electrospray ionization mass spectrometry and novel data analysis algorithms. *Journal of Proteome Research*, 5:414–421, 2006.
- [14] Manuel Bodirsky, Clemens Gröpl, Daniel Johannsen, and Mihyun Kang. A direct decomposition of 3-connected planar graphs. In *Proceedings of the 17th Annual International Conference on Formal Power Series and Algebraic Combinatorics (FPSAC05)*. Taormina, 2005.
- [15] Manuel Bodirsky, Clemens Gröpl, and Mihyun Kang. Sampling unlabeled biconnected planar graphs. In *Proceedings of the 16th Annual International Symposium on Algorithms and Computation (ISAAC05)*. 2005.
- [16] Clemens Gröpl, Eva Lange, Knut Reinert, Oliver Kohlbacher, Marc Sturm, Christian G. Huber, Bettina M. Mayr, and Christoph L. Klein. Algorithms for the automated absolute quantification of diagnostic markers in complex proteomics samples. In *Proceedings of the 1st International Symposium on Computational Life Science (CompLife05)*, pages 151–163. 2005.
- [17] Clemens Gröpl, Hans Jürgen Prömel, and Anand Srivastav. Ordered binary decision diagrams and the Shannon effect. *Discrete Applied Mathematics*, 142:67–85, 2004.
- [18] Manuel Bodirsky, Clemens Gröpl, and Mihyun Kang. Decomposing, counting, and generating unlabeled cubic planar graphs. In *European Conference on Combinatorics, Graph Theory, and Applications EUROCOMB'03 Prague*. 2003.
- [19] Manuel Bodirsky, Clemens Gröpl, and Mihyun Kang. Generating labeled planar graphs uniformly at random. In *Proceedings of ICALP 2003*, number 2719 in *Lecture Notes in Computer Science*, pages 1095–1107. Springer Verlag, 2003. Appeared 2008 in *Theoretical Computer Science*.
- [20] Cornelius Frömmel, Christoph Gille, Andrean Goede, Clemens Gröpl, Stefan Hougardy, Till Nierhoff, Robert Preissner, and Martin Thimm. Accelerating screening of 3D protein data with a graph theoretical approach. *Bioinformatics*, 19(18):2442–2447, December 2003.
- [21] Clemens Gröpl, Stefan Hougardy, Till Nierhoff, and Hans Jürgen Prömel. Steiner trees in uniformly quasi-bipartite graphs. *Information Processing Letters*, 83:195–200, 2002.
- [22] Clemens Gröpl, Stefan Hougardy, Till Nierhoff, and Hans Jürgen Prömel. Approximation algorithms for the Steiner tree problem in graphs. In Xiuzhen Cheng and Ding-Zhu Du, editors, *Steiner Trees in Industry*, pages 235–279. Kluwer Academic Publishers, 2001. Survey article with new proofs.
- [23] Clemens Gröpl, Stefan Hougardy, Till Nierhoff, and Hans Jürgen Prömel. Lower bounds for approximation algorithms for the Steiner tree problem. In *Proceedings of the 27th International Workshop on Graph-Theoretic Concepts in Computer Science (2001)*, LNCS. Springer Verlag, 2001.
- [24] Clemens Gröpl, Hans Jürgen Prömel, and Anand Srivastav. On the evolution of the worst-case OBDD size. *Information Processing Letters*, 77:1–7, 2001.
- [25] Gregor Baudis, Clemens Gröpl, Stefan Hougardy, Till Nierhoff, and Hans Jürgen Prömel. Approximating minimum spanning sets in hypergraphs and polymatroids. Technical report, Humboldt-University Berlin, 2000. This paper was already accepted for ICALP 2000 but we did not present it since later we were informed that the main result had already been proven in a different way.
- [26] Clemens Gröpl. *Binary Decision Diagrams for Random Boolean Functions*. Ph.D. thesis, Humboldt-Universität zu Berlin, 1999.

- [27] Clemens Gröpl, Hans Jürgen Prömel, and Anand Srivastav. Size and structure of random ordered binary decision diagrams (extended abstract). In Daniel Korb, Christoph Meinel, and Michel Morvan, editors, *STACS 98*, number 1373 in *Lecture Notes in Computer Science*, pages 238–248. Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 1998.
- [28] Clemens Gröpl and Martin Skutella. Parallel repetition of MIP(2,1) systems. In Ernst W. Mayr, Hans Jürgen Prömel, and Angelika Steger, editors, *Lectures on Proof Verification and Approximation Algorithms*, volume 1367 of *Lecture Notes in Computer Science*, chapter 6, pages 161–177. Springer, 1998. The book grew out of a Dagstuhl Seminar, April 21–25, 1997.
- [29] Mathias Block, Clemens Gröpl, Harry Preuss, Hans Jürgen Prömel, and Anand Srivastav. Efficient ordering of state variables and transition relation partitions in symbolic model checking. Technical report, Humboldt-Universität zu Berlin, 1997.
- [30] Clemens Gröpl. *Über Approximationsalgorithmen zur Färbung k -färbbarer Graphen, die vektorchromatische Zahl und andere Varianten der ϑ -Funktion*. Diplomarbeit, Rheinische Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn, Forschungsinstitut für Diskrete Mathematik, January 1996.