

Steinbuch Centre for Computing

NEWS

SCC

100 GBit/s zwischen KIT und
Universität Heidelberg

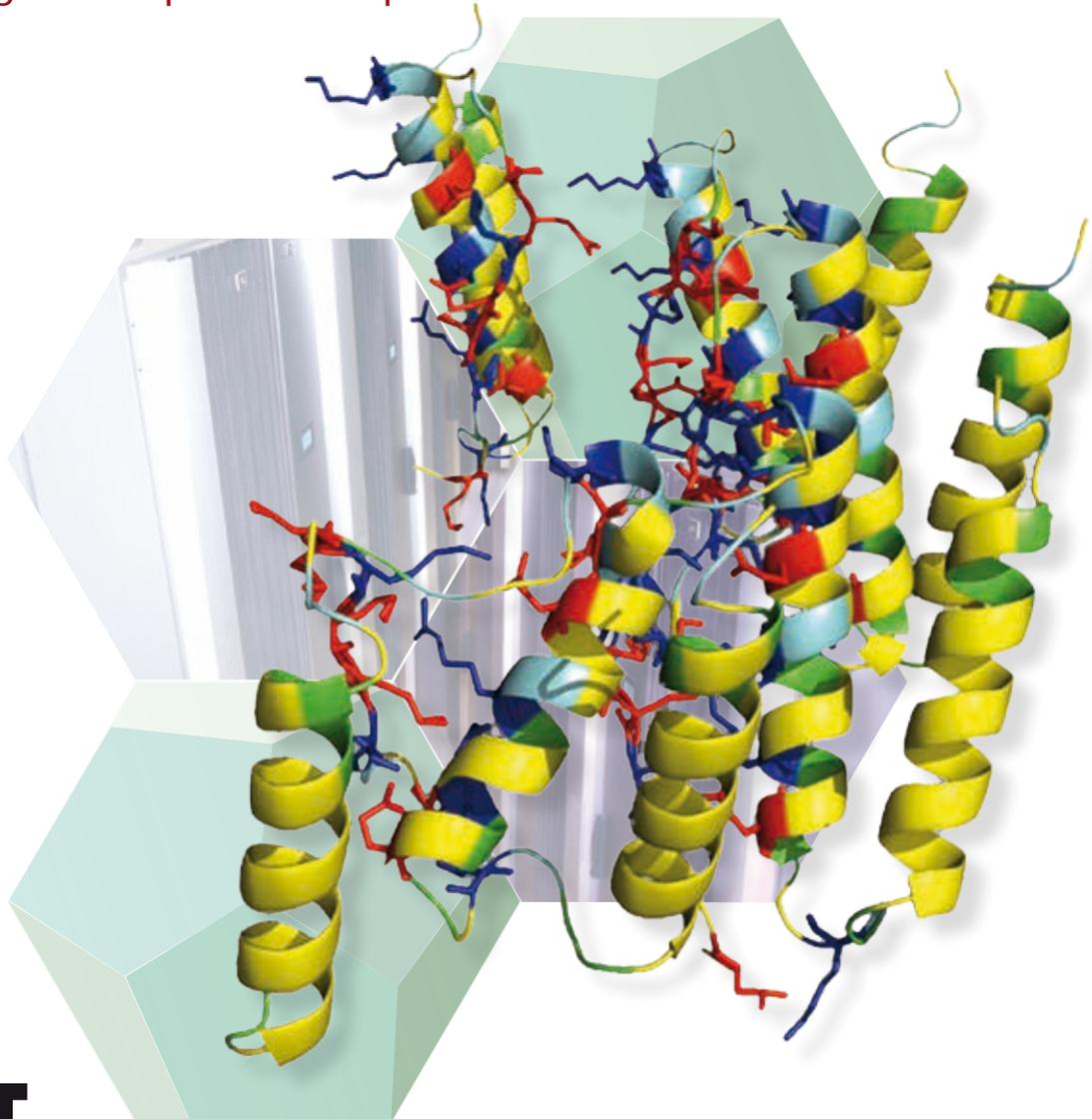
100 Gigabit/s between KIT and Heidelberg

Landesprojekt „bwHPC-C5“ gestartet

State project “bwHPC-C5” started

Von der Gensequenz zur Proteinstruktur

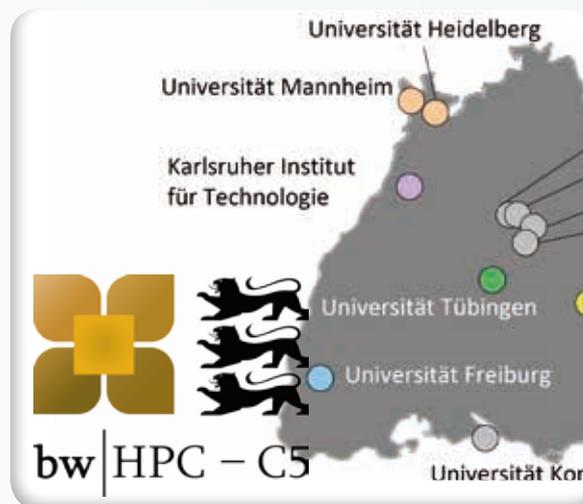
From gene sequences to protein structures



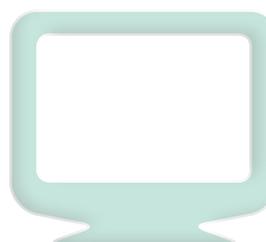
INHALT

- 4
Landeshochschulnetz BelWü auf der Überholspur: 100 GBit/s zwischen KIT und Universität Heidelberg
- 6
Landesprojekt „bwHPC-C5“ gestartet
Föderative Fachkompetenzzentren unterstützen Landesnutzer beim Einstieg ins Hochleistungsrechnen
- 10
Von der Gensequenz zur Proteinstruktur
HPC-5-Projekt: Neue Verfahren ermöglichen rechnergestützte Vorhersage von Proteinstrukturen auf parallelen Hochleistungsrechnern
- 12
Facebook-Apps: Gefahren für die Privatsphäre
- 14
Dissertation
Avoiding Unintended Flows of Personally Identifiable Information
Enterprise Identity Management and Online Social Networks
- 16
Studierende entwickeln „Privatsphäre-Apps“ im Praktikum Web-Engineering
- 18
Elektronischer Rechtsverkehr
DFG-Projekt „BeLab“ – Konzepte für das beweissichere elektronische Laborbuch
- 20
Monitoring-Umgebung am SCC wird vereinheitlicht
- 23
„Simulierte Welten“ für Preis der Robert Bosch Stiftung nominiert
- 24
Datenanalyse im Fokus: Zweites internationales Big Data-Symposium am KIT
- 25
11. Internationale GridKa Summer School am SCC
- 27
3. EMAC-Symposium am SCC
Globales Chemie-Klimamodell simuliert Atmosphäre bis in eine Höhe von 80 Kilometern
- 28
Delegation der Universität Süd-Ural am SCC

- 29
552. WE-Heraeus-Seminar
„Physics of biomolecular Folding and Assembly: Theory meets Experiment“
- 30
SCC-Informationsstand bei der Erstsemesterbegrüßung
Druckdienste, WLAN und Poolräume im Mittelpunkt der Fragen
- 31
Juniorvorlesung zur Privatsphäre in sozialen Medien
- 32
SCC auf internationaler Supercomputing Conference ISC13
- 33
Gold für den Software-Cluster: Europäische Auszeichnung für exzellentes Cluster Management
- 34
Neues Zertifikat „Softwareinnovationen für das Digitale Unternehmen“ im Masterstudium Informatik



6



20



12

EDITORIAL

Liebe Leserinnen und Leser,

in diesem Jahr hat sich die Aufgabenverteilung in der Führungsspitze des SCC geändert. Prof. Dr. Hannes Hartenstein hat das Amt des Geschäftsführenden Direktors turnusgemäß nach drei Jahren niedergelegt. Seit dem 1. Oktober 2013 ist Prof. Dr. Bernhard Neumair Geschäftsführender Direktor des SCC und Prof. Dr. Achim Streit stellvertretender Geschäftsführender Direktor.

In diesem Heft dreht es sich unter anderem um die 100 Gigabit/s-Daten-Weitverkehrsstrecke zwischen Karlsruhe und Heidelberg, die im Juli 2013 in Betrieb genommen wurde. Innerhalb des Landeshochschulnetzes Baden-Württemberg (BelWü) steht der datenintensiven Forschung damit eine Infrastruktur auf höchstem Niveau zur Verfügung.

Das Landesprojekt „bwHPC-C5“, das ebenfalls im Juli startete, fügt sich nahtlos in das Landeskonzept „bwHPC“ ein, das eine Förderung des High Performance Computing (HPC) auf allen Ebenen vorsieht. Das vom SCC koordinierte Projekt hat sich zum Ziel gesetzt, die Landesnutzer über föderative Fachkompetenzzentren beim Einstieg ins Hochleistungsrechnen zu unterstützen.

Ein anderes Vorhaben im Hochleistungsrechnerbereich, an dem das SCC ebenfalls maßgeblich beteiligt war und dessen Ergebnisse in der Abschlussbegutachtung als „hervorragend“ bewertet wurden, war „HPC-5“. Innerhalb dieses Projekts wurden ganz neue Verfahren zur rechnergestützten Vorhersage von Proteinstrukturen auf parallelen Hochleistungsrechnern hervorgebracht.

Weitere aktuelle Entwicklungen am SCC erwarten Sie auf den nächsten Seiten. Wir wünschen Ihnen viel Vergnügen bei der Lektüre!

Dear readers,

this year the allocation of tasks in SCC's top management team has changed. Prof. Dr. Hannes Hartenstein has resigned as scheduled from the office of SCC's Executive Director after three years. Since 1st October 2013 Prof. Dr. Bernhard Neumair has been the Executive Director of SCC and Prof. Dr. Achim Streit has taken over the task of the Deputy Executive Director.

Topics in this issue are among others the long-distance data transmission line of 100 gigabits between Karlsruhe und Heidelberg having started operation in July 2013. Within the Baden-Wuerttemberg State University Network (BelWü) data-intensive research thereby has an infrastructure at the highest level.

The state project "bwHPC-C5" kicked off also in July 2013 fits in seamlessly with the state concept "bwHPC" which implies the advancement of high performance computing at all levels. Aim of the project, coordinated by SCC, is the organisation of federated HPC competence centres as an interface between science and high performance computing.

Another project in the field of high performance computing, in which SCC had played a decisive part and the results of which had been assessed as "excellent", was "HPC-5". Within this project, new methods for protein structure prediction have been developed being suitable for deployment on modern high performance computers.

For English speaking readers the present issue will provide brief summaries of further projects and current developments at SCC. We hope that you will enjoy reading it!

Hannes Hartenstein, Bernhard Neumair, Achim Streit



Prof. Dr. Hannes Hartenstein



Prof. Dr. Bernhard Neumair



Prof. Dr. Achim Streit

IMPRESSUM

Dezember 2013

Herausgegeben im Auftrag des Direktoriums des Steinbuch Centre for Computing (SCC) von der Stabsstelle Öffentlichkeitsarbeit und Kommunikation

Anschrift:

Steinbuch Centre for Computing (SCC)

Redaktion SCC-News

Zirkel 2

76131 Karlsruhe bzw.

Hermann-von-Helmholtz-Platz 1

76344 Eggenstein-Leopoldshafen

Fax: 0721/32550

<http://www.scc.kit.edu/publikationen/scc-news>

Redaktion:

Ursula Scheller (verantwortlich)

Telefon: 0721/608-44865

E-Mail: ursula.scheller@kit.edu

Layout und Bildredaktion: John Atkinson

Redaktionell bearbeitete Texte werden mit (red) gekennzeichnet.

Nachdruck und elektronische Weiterverwendung von Texten und Bildern nur mit ausdrücklicher Genehmigung der Redaktion.

Landeshochschulnetz BelWü auf der Überholspur: 100 GBit/s zwischen KIT und Universität Heidelberg

Die erste Daten-Weitverkehrsstrecke mit einer Datenrate von 100 Gigabit pro Sekunde ist im Juli 2013 in den produktiven Betrieb gestartet. Innerhalb des Landeshochschulnetzes Baden-Württemberg (BelWü) verbindet sie das KIT und die Universität Heidelberg mit einer Geschwindigkeit, die etwa 10.000mal schneller als eine übliche private Internetverbindung ist. Damit steht der datenintensiven Forschung eine leistungsfähige Infrastruktur zur Verfügung.

„Exzellente Forschung benötigt eine konkurrenzfähige Infrastruktur auf Weltniveau. Die Speicherung und Nutzung großer Datenmengen ist die Grundlage in vielen Bereichen wissenschaftlicher Forschung. Der Ausbau von BelWü auf diese Leistungsfähigkeit erlaubt nicht nur neue und kostengünstigere Betriebsabläufe, sondern bildet vor allem eine hervorragende Basis für Forschungsaktivitäten im Bereich der Datennetze. Dies betrifft zum Beispiel die Datensicherheit bei sehr hohen Datenraten oder auch die Erprobung neuer Technologien“, so Wissenschaftsministerin Theresia Bauer.

Das Land hat für den Ausbau rund 500.000 Euro investiert. Verbunden wurden zunächst das KIT und die Universität Heidelberg als Standorte der Large Scale Data Facility (LSDF). In den kommenden Jahren soll das gesamte BelWü-Backbone-Netz auf 100G erweitert werden.

„Wissenschaftliche großskalige Daten sind die Basis der modernen Forschung und deren Management und Analyse sind der Schlüssel zu neuen Erkenntnissen und Innovationen“, erklärte Prof. Dr. Wilfried Jüling, Chief Science and Information Officer am KIT. „Die gesteigerte Datenrate wird uns helfen, datenintensive Prozesse in Forschung und Wissenschaft zu unterstützen und zu optimieren. Informationstechnologie und Informatik am KIT entwickeln zuverlässige Methoden und effiziente Algorithmen und unterstützen Nutzer bei Aufbewahrung, Bereitstellung, Analyse, Erkenntnisgewinnung und Visualisierung ihrer Daten.“

Mit der Large Scale Data Facility (LSDF) wurde 2010 im gleichnamigen baden-württembergischen Landesprojekt ein neuartiges Konzept für die Speicherung, Verwaltung, Archivierung und Analyse von wissenschaftlichen Daten entwickelt und in Betrieb genommen. Die Universität Heidelberg ist mit Rechenzentrum (URZ) und BioQuant in Zusammenarbeit mit dem SCC an der weiteren Umsetzung und Entwicklung des Speicherkonzepts beteiligt.

(red)



BelWü State University Network in the fast lane: 100 Gigabit/s between KIT and Heidelberg

In July 2013 the first long-distance data transmission line of 100 gigabits per second started operation. It connects KIT with Heidelberg University within the Baden-Wuerttemberg State University Network (BelWü). The data transmission rate of this high-performance infrastructure facility exceeds that of a conventional private internet connection by a factor of about 10,000, which is needed for data-intensive research. The State of Baden-Wuerttemberg invested about EUR 500,000 in the extension of the network. In the near future, the complete BelWü backbone network is planned to be upgraded to 100 Gigabit/s.

Landesprojekt „bwHPC-C5“ gestartet

Föderative Fachkompetenzzentren unterstützen Landesnutzer beim Einstieg ins Hochleistungsrechnen

Um der stetig zunehmenden Bedeutung des wissenschaftlichen Rechnens in Forschung, Lehre und Studium Rechnung zu tragen, wurde in Baden-Württemberg für das Hoch- und Höchstleistungsrechnen ein geschlossenes Landeskonzept „bwHPC“ entwickelt, das die Förderung des High Performance Computing (HPC) auf allen Ebenen umfasst. Als landesweites Begleitprojekt koordiniert „bwHPC-C5“ seit Juli 2013 die föderative Unterstützung der HPC-Nutzer und die damit verbundenen Maßnahmen und Aktivitäten in Baden-Württemberg. Die Auftaktveranstaltung im Oktober 2013 am KIT bot Gästen und Projektteilnehmern die Möglichkeit, sich zum Projekt bwHPC-C5, aber auch über vorausgegangene Projekte oder Initiativen und Ideen anderer Kollaborationen auszutauschen.

Prof. Dr. Wilfried Juling, Chief Science und Information Officer des KIT, und Peter Castellaz, stellvertretender Referatsleiter im Ministerium für Wissenschaft, Forschung und Kunst Baden-Württemberg, begrüßten die rund 60 Teilnehmer aus Universitäten, Hochschulen und Industrie in Baden-Württemberg und Hessen und würdigten in ihrer Ansprache insbesondere den föderativen Charakter des baden-württembergischen Hochleistungsrechnens.

Das Projekt, das von neun Universitäten und zwei Hochschulen des Landes getragen wird, markiert einen wichtigen Meilenstein zur Unterstützung der HPC-Nutzer in Baden-Württemberg. Ziel ist die Einrichtung föderativer Fachkompetenzzentren als Bindeglied zwischen Wissenschaft und Hochleistungsrechnen. Welche Bedeutung den koordinierenden Maßnahmen zwischen Fachkompetenzzentren und Hochleistungsrechnerbetreibern dabei zugemessen wird, verdeutlicht bereits der Projektname „Coordinated Compute Clusters Competence Centers“ (bwHPC-C5). Das Projekt ist jedoch keine Einzelinitiative des Landes, sondern Bestandteil des neuen Umsetzungskonzepts für das Hochleistungsrechnen in Baden-Württemberg „bwHPC“. Das bwHPC-Konzept [1] sieht neben der Neuordnung der HPC-Systeme der

Leistungsklasse 3 die Schaffung eines durchlässigen HPC-Ökosystems mit unterschiedlichen Klassen (s. Abbildung 1) und entsprechenden HPC-Fachkompetenzzentren bis 2016 vor. Die Neuordnung der Systeme ist die Antwort auf die steigende Bedeutung des wissenschaftlichen Rechnens in Forschung, Lehre und Studium. Die Leistungsklasse 3 bildet dabei den HPC-Enabler und soll den Einstieg in höhere Klassen erleichtern.

bwHPC-C5 und bwGRiD

Das Projekt bwHPC-C5 beinhaltet die konsequente Weiterentwicklung der koordinierten, nutzerseitigen Unterstützung für HPC-Systeme in Baden-Württemberg. Ein Verbund aus gleichartig aufgebauten Rechensystemen, das bwGRiD, wird Wissenschaftlern als Infrastruktur bereits seit 2008 von acht Landesuniversitäten und einer Landeshochschule angeboten. Erste Maßnahmen einer landesweiten Nutzerunterstützung für diese Infrastruktur wurden mit dem zweijährigen Projekt „bwGRiD ergänzende Maßnahmen“ von 2011 bis 2013 umgesetzt. bwGRiD und seine Unterstützungsmaßnahmen sind Vorläufer und Bausteine von bwHPC und bwHPC-C5. bwHPC ist jedoch kein designierter Nachfolger

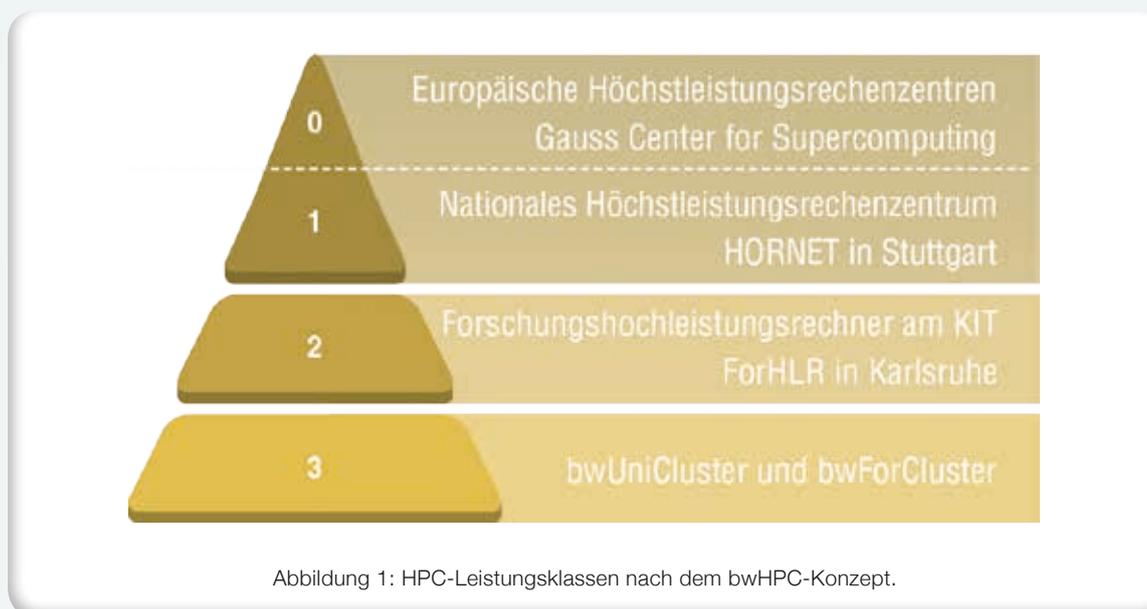


Abbildung 1: HPC-Leistungsklassen nach dem bwHPC-Konzept.

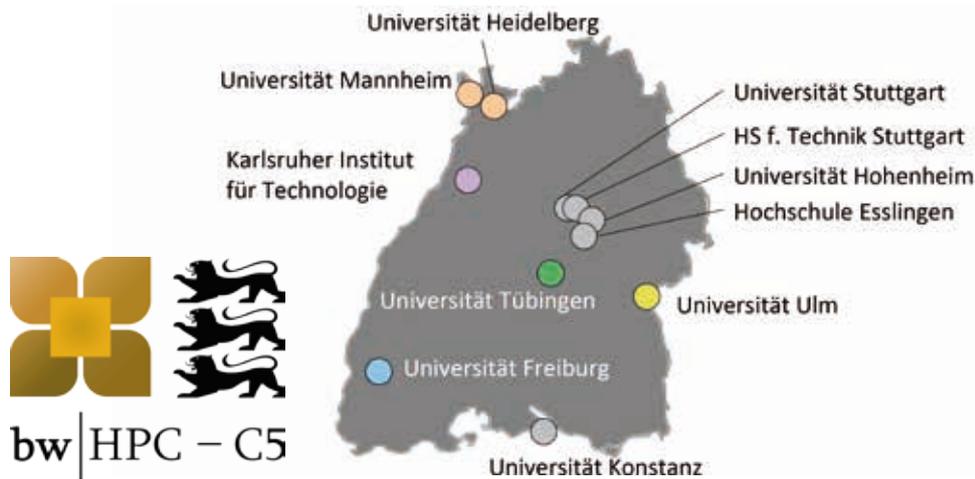


Abbildung 2: Projektteilnehmer bwHPC-C5 der Phase 1.

von bwGRiD, da die erhöhte Komplexität der Anforderungen an das Hochleistungsrechnen den Wandel vom Konzept gleichartig aufgebauter Rechensysteme zum differenzierten Angebot von Architektur und HPC-Leistungsklassen notwendig machen.

Nachhaltigkeit und Erfolg des bwGRiD

Mit dem Projekt „bwGRiD ergänzende Maßnahmen“ galt es, den Übergang von bwGRiD zu bwHPC einzuleiten und Nachhaltigkeit für bwHPC-C5 zu schaffen sowie Entwicklungen als Bausteine in bwHPC-C5-Aktivitäten und -Maßnahmen aufzunehmen und weiterzuentwickeln. Neben der Initiierung einer Fachkompetenzbündelung wurden Entwicklungen anderer Landesprojekte wie ein vereinfachter Benutzerzugang aufgegriffen und auf bwGRiD pilotiert. Hierzu zählen die Projekte bwIDM zur föderierten Authentifizierung und Autorisierung sowie das bwGRiD-Portal als webbasierte Benutzeroberfläche. Mit Blick auf die kommende Ausdifferenzierung wurden Datenmanagementwerkzeuge erprobt und föderative Dienste, wie Ticketsystem und Cluster- und Software-Monitoring geschaffen. Aktionen zur gezielten Berücksichtigung spezieller Anforderungen von Wissenschaftsfachbereichen gehörten hier ebenso dazu. Der Erfolg der bwGRiD-Maßnahmen lässt sich mit über 400 Publikationen und über 130 Wissenschaftsprojekten eindrucksvoll belegen und reflektiert das gelungene Zusammenwirken der Rechenzentren und die erzielten Synergieeffekte in Baden-Württemberg.

HPC-Fachkompetenzzentren

Das Zusammenwirken der Rechenzentren wird mit bwHPC und dem bwHPC-C5-Projekt eine neue Qualitätsstufe erreichen. Die HPC-Fachkompetenzzentren werden durch die Standorte der neuen HPC-Ressourcen der Leistungsklasse 3 koordiniert, aber durch alle elf am Projekt teilnehmenden Standorte (s. Abbildung 2) ausgestaltet.

In seiner gegenwärtigen Form sieht das bwHPC-Konzept die Koordination von den in Abbildung 3 genannten

Wissenschaftsfachbereichen an den Standorten Mannheim/Heidelberg, Ulm, Freiburg und Tübingen vor. Weitere Wissenschaftsbereiche werden dabei nicht ausgeschlossen, sondern durch die allgemeine Fachbereichsversorgung abgedeckt. Karlsruhe wird diese Aufgabe als Standort des grundversorgenden bwUniClusters, dessen Kürzel „Uni“ für Universität bzw. universal steht, koordinieren.

Das Ineinandergreifen der Fachkompetenzzentren mit den spezifischen Anforderungen der Wissenschaft auf der einen Seite und dem Rechnerbetrieb auf der anderen Seite stellt die horizontale Verzahnung im Sinne des bwHPC-Konzepts dar.

bwHPC-C5-Konzept

Das Projekt bwHPC-C5 wird im Kontext der föderativen Wissenschaftsunterstützung Benutzer landesweit für die zur Verfügung gestellten Ressourcen schulen und den Übergang bis zur Leistungsklasse 1 und 0 durch entsprechende Angebote unterstützen. Dies ist die vertikale Verzahnung im Sinne des bwHPC-Konzepts.

Die Unterstützung der Wissenschaftler allein reicht jedoch nicht, um die Neuordnung der im Hinblick auf die jeweiligen Wissenschaftsbereiche optimierten Clusterressourcen der Leistungsklasse 3 zu beflügeln und im Wert zu maximieren. Das Projekt bwHPC-C5 umfasst daher drei weitere Aufgabenbereiche, die den Wissenschaftlern insgesamt zu Gute kommen: föderatives Dienstmanagement, Integrationsmaßnahmen von HPC-Innovationen und Öffentlichkeitsarbeit.

Das föderative Dienstmanagement in bwHPC-C5 koordiniert die Umsetzung der nachhaltig geschaffenen Dienste aus anderen Landesinitiativen (bwIDM, bwLSDF und bwGRiD etc.) und der einheitlichen Arbeitsumgebung für die Benutzer auf der HPC-Leistungsebene 3. Es setzt außerdem Informations- und Support-Portale auf föderaler Ebene um und schafft Werkzeuge für eine föderativ zugängige Administration nutzerspezifischer Konfigurationseinstellungen. Bei all diesen Maßnahmen

werden ebenso entsprechende Datensicherheitsaspekte berücksichtigt. Die Integration von Wissenschaftsgemeinden beinhaltet auch spezielle Anforderungen an die HPC-Systeme. HPC-Innovationen werden übergeordnet im Dialog zwischen Benutzern und HPC-Betreiberstandorten evaluiert, geplant und realisiert. Schließlich kommt der Öffentlichkeitsarbeit die Aufgabe zu, die Sichtbarkeit des Projekts und seine Attraktivität für die Landesbenutzer zu erhöhen.

Kennung der Heimat-Universität bzw. Heimathochschule benötigt. Diese Webregistrierung dient auch der Unterstützung des Benutzers bei der Ermittlung der für sein Fachgebiet geeigneten HPC-Ressource. Gleichzeitig erhält er Hinweise auf fachspezifische Beratungs-, Support- und Schulungsangebote. Neuen Benutzern erschließt sich so ein einfacher und landesweiter Zugang zu Know-how im Umgang mit den HPC-Systemen der Leistungsklasse 3 in Baden-Württemberg.



Abbildung 3: HPC-Fachkompetenzzentren und ihre Koordinationsstandorte in Baden-Württemberg.

bwHPC-C5 soll die beschriebenen Maßnahmen von 2013 bis 2018, d.h. für 5 Jahre, koordinieren – ein Zeitraum der vielen Veränderungen, zum Beispiel durch den Aufbau einer neuen HPC-Infrastruktur, unterliegt. Daher ist eine zeitliche Zerteilung des Projekts vorgesehen, um durch Evaluation Korrekturen im Projektablauf einführen zu können. In der bereits laufenden Phase 1 liegen die Schwerpunkte der vier Aufgabenbereiche auf der föderativen Wissenschaftsunterstützung und dem föderativen Dienstmanagement. Für die föderative Wissenschaftsunterstützung bedeutet dies, dass hier insbesondere die Migrationshilfe für die Benutzer auf die neuen HPC-Systeme im Mittelpunkt steht. Dazu müssen natürlich auch die dahinterliegenden Dienste in der angestrebten Form funktionieren. Mit abgeschlossener Evaluation der Phase 1 Ende 2015 und mit Start der Phase 2 im Jahr 2016 werden die neuen Aufgabenbereiche definiert sein, wobei absehbar neben der zentralen Wissenschaftsunterstützung die Koordination der Integrationsmaßnahmen für Clusterinnovationen einen Schwerpunkt bilden wird.

Was können Benutzer erwarten?

bwHPC-C5 bietet den Nutzern im Land einen umfassenden und bedarfsorientierten Service rund um die vorhandenen HPC-Systeme.

- So werden regelmäßig stattfindende Informationsveranstaltungen an den Standorten aller Projektteilnehmer angeboten, um neuen Benutzern u.a. den Erstzugang zu den Systemen zu erleichtern.
- Der Zugang zu den verschiedenen HPC-Ressourcen der Leistungsklasse 3 wird stark vereinfacht, nach einer erfolgreichen Webregistrierung wird lediglich die

- Neben dem vereinfachten Zugang zu den HPC-Ressourcen wird eine clusterübergreifende vereinheitlichte Arbeitsumgebung angeboten, dazu zählen Portale zum vereinfachten Cluster-Zugang bzw. zur vereinfachten Softwarenutzung. Erweiterungen und Neuerungen finden in Absprache zwischen den Benutzern und den HPC-Fachkompetenzzentren statt.
- Den Benutzern wird ein umfangreiches Portfolio an fachspezifischer Software angeboten, dessen Erweiterung über die Fachkompetenzzentren in enger Absprache mit den wissenschaftlichen Arbeitsgruppen des Landes stattfindet.
- Die HPC-Fachkompetenzzentren leisten Hilfestellung bei der Migration von bwGRiD- auf bwHPC-Systeme bzw. von Desktop- auf HPC-Systeme. In Zusammenarbeit mit den Fachkompetenzzentren werden Aktionsteams gebildet, die Maßnahmen wie eine Code-Portierung, Code-Optimierung oder Code-Parallelisierung unterstützen oder einem Übergang auf höhere HPC-Leistungsebenen beratend beistehen.
- Es wird eine umfangreiche und stets aktuelle Dokumentation angeboten, die allgemein, aber insbesondere fach- und softwarespezifische Problemszenarien aufgreift, s. <http://www.bwhpc-c5/wiki>.
- Neben der Dokumentation für das Eigenstudium finden landesweit koordinierte Schulungen in Form von Workshops, Seminaren und Webinaren statt. Die Schulungen werden auch Kurse zu fachspezifischer Software einschließen und über die Webseite des Projekts abrufbar sein.

Von der Gensequenz zur Proteinstruktur

HPC-5-Projekt: Neue Verfahren ermöglichen rechnergestützte Vorhersage von Proteinstrukturen auf parallelen Hochleistungsrechnern

Gensequenzen bilden den Bauplan aller Proteine in lebenden Organismen. In diversen Genom-Projekten wurden die Baupläne des Menschen wie auch anderer Organismen entschlüsselt und der Forschung zur Verfügung gestellt. Um jedoch zu verstehen und vorherzusagen, wie die durch Gene codierten Proteine funktionieren und miteinander wechselwirken, ist die Kenntnis ihrer räumlichen Struktur unerlässlich. Leider sind experimentelle Verfahren zur Strukturbestimmung aufwändig und auf wichtige Proteinfamilien, wie Membranproteine, nur eingeschränkt anwendbar. Deshalb sind rechnergestützte Verfahren zur Proteinstrukturvorhersage gefragt.

Die große Herausforderung besteht darin, Vorhersagen mit solcher Zuverlässigkeit und Qualität bereitzustellen, dass diese für Anwendungen in den Lebenswissenschaften genutzt werden können. Zur Bewältigung dieser Aufgabe haben das SimLab NanoMikro des SCC und die Nanoscale and Biomolecular Simulation Group des Instituts für Nanotechnologie (INT) für das Projekt „Hochdurchsatz-Proteinstrukturvorhersage auf hybriden und verteilten Höchstleistungs-Architekturen“ der Baden-Württemberg Stiftung (HPC-5-Projekt) kooperiert. Das Projekt startete im Juli 2009 unter der Leitung von Prof. Dr. Wolfgang Wenzel (INT) und Dr. Ivan Kondov (SCC). Weitere Mitarbeiter waren Timo Strunk und Moritz Wolf vom INT sowie Martin Brieg und Konstantin Klenin vom SCC. Das Projekt endete im Juni 2013.

Ziel des Vorhabens war es, neue Verfahren zur Proteinstrukturvorhersage zu entwickeln, die die Möglichkeiten paralleler Hochleistungsrechner und hybrider Architekturen, wie bei Grafikprozessoren, ausnutzen können. Diese Verfahren sollten dann der wissenschaftlichen Gemeinschaft in geeigneter Weise zugänglich gemacht und ihr Nutzen in verschiedenen Kooperationen mit experimentellen Partnern verdeutlicht werden.

Proteine sind lange Ketten aus Aminosäuren, die im Gegensatz zu übrigen Polymeren ihre Eigenschaften dadurch erhalten, dass sie eine klar definierte Struktur annehmen

können, in der sie ihre Aufgaben erfüllen. Die Abfolge der Aminosäuren ergibt sich dabei direkt aus der Gensequenz. Die Vorhersage einer solchen Proteinstruktur lässt sich in zwei Hauptaufgaben gliedern. Zum einen müssen Strukturkandidaten generiert werden, welche die typischen Struktureigenschaften von Proteinen aufweisen. Aus diesen Kandidaten muss dann anhand passender Kriterien das Modell ausgesucht werden, welches am besten mit der unbekanntem nativen Struktur des Proteins übereinstimmt. Im Rahmen des HPC-5-Projektes wurden erhebliche Anstrengungen unternommen, um diese beiden Aufgaben besser zu lösen.

Bei der Generierung von Kandidaten diente die Natur als Vorbild: es wurde ein genetischer Algorithmus entworfen, welcher anhand einer Population von Startstrukturen iterativ neue und bessere Populationen von Kandidaten erstellt. Während einer Iteration wird dabei aus den Mitgliedern der vorherigen Population mittels Kreuzungen zwischen den Mitgliedern und Monte Carlo-Simulationen ein neues Ensemble von Strukturen generiert. Dieses Ensemble wird dann mit Hilfe eines physikalisch fundierten Kraftfeldes bewertet. Die neue Population ergibt sich aus den energetisch günstigsten Strukturen des generierten Ensembles und der vorherigen Population. Dabei wird auch berücksichtigt, dass diese Strukturen einander nicht zu ähnlich sind, um eine Diversität in der Population zu gewährleisten.

Weiterhin wurden in diesen Algorithmus Schnittstellen implementiert, um eine große Menge an Strukturinformationen aus etablierten Verfahren der Bio-Informatik bei der Modellgenerierung mit einbeziehen zu können. Zur Berücksichtigung der wässrigen Umgebung von Proteinen haben wir verbesserte implizite Lösungsmittelmodelle entworfen und implementiert. Deren Berechnung konnte zum Teil mittels des OpenCL-Standards auf Grafikprozessoren umgesetzt werden.

Die oben genannten Verfahren wurden dabei in das SIMONA-Softwarepaket zur Simulation nanoskaliger Systeme implementiert, welches der wissenschaftlichen Gemeinschaft kostenlos

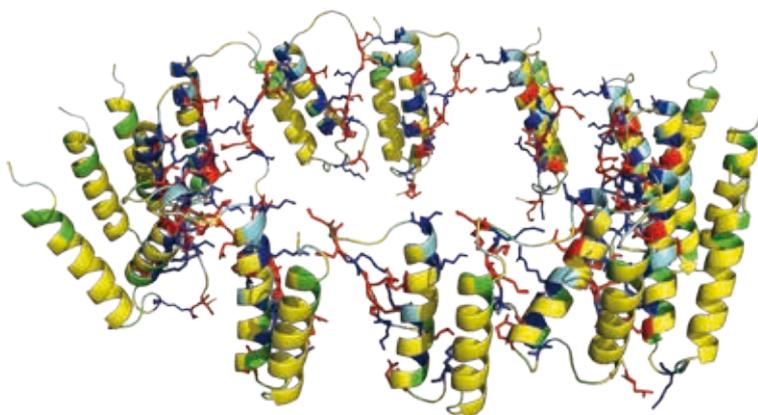


Abbildung 1: In Kooperation mit der Gruppe von Prof. Dr. Anne S. Ulrich (Institut für Biologische Grenzflächen, KIT) entwickeltes Modell einer Zellpore aus Twin-Arginine-Translokase-A-Proteinen, durch die andere gefaltete Proteine aus Zellen hinaus transportiert werden können.

zur Verfügung steht und mit Hilfe seiner grafischen Oberfläche einen benutzerfreundlichen Einstieg gewährleistet. Ein neu entwickeltes Verfahren zur Qualitätsbewertung von Proteinmodellen wurde weiterhin über einen Webservice zugänglich gemacht. Die Methoden wurden zum Teil während zwei weltweiten Wettbewerben zur Proteinstrukturvorhersage „Critical Assessment of Protein Structure Prediction“ (CASP) in den Jahren 2010 und 2012 erfolgreich eingesetzt.

Die im Rahmen dieses Projektes geleisteten Arbeiten und Ergebnisse wurden in 20 wissenschaftlichen Publikationen veröffentlicht und auf diversen Fachkonferenzen präsentiert. So konnte zum Beispiel in Zusammenarbeit mit der Gruppe von Prof. Dr. Anne S. Ulrich (Institut für Biologische Grenzflächen, KIT) geklärt werden, wie sich bestimmte Proteine zu einer Pore in der Zellmembran anordnen, um den Transport anderer gefalteter Proteine aus der Zelle zu ermöglichen [1].

In einer anderen Kooperation ist es mit Hilfe eines im Rahmen des Projekts neu erstellten Modells des HERG-Kalium-Ionen-Kanals gelungen, Nebenwirkungen eines Antidepressivums auf das Herz besser zu verstehen [2]. Ein weiteres Beispiel für eine erfolgreiche Zusammenarbeit ist die Erstellung eines Modells des Gasvesikel-Proteins GvpA in Übereinstimmung mit experimentellen Daten. Anhand des Modells konnte die Anordnung mehrerer dieser Proteine zur Stabilisierung von Gasblasen in Zellen vorhergesagt werden, die den Zellen größeren Auftrieb verleihen [3].

Die im Rahmen des Projekts erzielten Ergebnisse wurden bei der Abschlussbegutachtung im Mai 2013 von den Gutachtern als „hervorragend“ bewertet. Insbesondere wurde die umfangreiche Publikation der Methoden und Ergebnisse gewürdigt, sowie deren Nachhaltigkeit durch die Implementierungen in das fortbestehende SIMONA-Softwarepaket.

Nach den Arbeiten zur Vorhersage statischer Proteinstrukturen im Rahmen des HPC-5-Projektes werden das SimLab NanoMikro und die AG von Prof. Wenzel ihre Forschung künftig gemeinsam auf die thermodynamische

Charakterisierung von Proteinstrukturen und Konformationsänderungen, welche die Proteine während ihrer Funktion durchlaufen, fokussieren. Auf diese Weise sollen Einblicke in die atomaren Mechanismen der Funktion von Proteinen gewonnen und das Verständnis der gezielten Beeinflussung dieser Mechanismen durch Pharmazeutika erhöht werden. Die in SIMONA implementierten Monte Carlo-Algorithmen und biomolekulare Kraftfelder bilden dabei eine ideale Plattform zur weiteren Entwicklung und Nutzung.

Martin Brieg

Ausgewählte Publikationen:

- [1] Walther, T. H. et al. Folding and Self-Assembly of the TatA Translocation Pore Based on a Charge Zipper Mechanism. *Cell* 152, 316–326 (2013).
- [2] Staudacher, I. et al. hERG K⁺ channel-associated cardiac effects of the antidepressant drug desipramine. *Naunyn-Schmiedeberg's Archives of Pharmacology* 383, 119–139 (2011).
- [3] Strunk, T. et al. Structural model of the gas vesicle protein GvpA and analysis of GvpA mutants in vivo. *Molecular Microbiology* 81, 56–68 (2011).

From gene sequences to protein structures

Generating the three dimensional structure of a protein encoded in a gene sequence is a key step in understanding its functions and interactions, and therefore one of the major challenges in life sciences. Due to the complexity and limitations of experimental structure determination techniques, there is a great demand for computational structure prediction methods. The SimLab NanoMicro at SCC and the Nanoscale and Biomolecular Simulation Group at the Institute of Nanotechnology have cooperated in the project “High Throughput Protein Structure Prediction on Hybrid and Distributed High Performance Architectures” (HPC-5). The aim of the project funded by the “Baden-Württemberg Stiftung” (foundation of the State of Baden-Wuerttemberg) was to develop and implement new methods for protein structure prediction that are suitable for deployment on modern high performance computers and easily accessible to the scientific community. The benefits of these new methods were demonstrated in several scientific applications together with experimental partners. After the end of the project in June 2013, the assessors praised the comprehensive publication of the results achieved and the sustainability of the project obtained by implementing the methods into the SIMONA simulation software package, which is freely available for academic use.

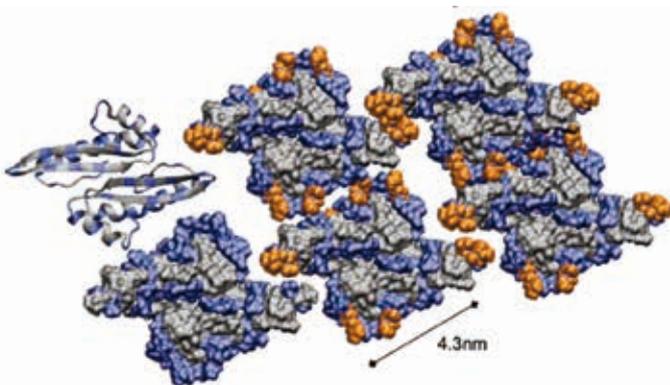


Abbildung 2: Im Rahmen des HPC-5-Projektes entwickeltes Modell eines Gasvesikel-Proteins GvpA (oben links) und die Anordnung mehrerer dieser Proteine zur Stabilisierung von Gasblasen in Zellen. Das Modell steht im Einklang mit experimentellen Daten der Kooperationspartner.

Facebook-Apps: Gefahren für die Privatsphäre

Externe Anwendungen, so genannte Apps (von engl. Applications), in sozialen Netzwerken (engl. Online Social Networks, OSNs) erfreuen sich bei Nutzern großer Beliebtheit. Diese Apps werden entweder vom Betreiber des OSN oder von Drittanbietern über eine Schnittstelle des OSN angeboten. Die Verwendung von Apps birgt jedoch Gefahren für die Privatsphäre der Nutzer, da ihre Daten potenziell an den Drittanbieter einer App weitergegeben werden können. Dabei ist für Nutzer oftmals nicht klar ersichtlich, welche Zugriffsberechtigungen sie einer App mit der Verwendung erteilen.

Dieses Problem wurde unter anderem im Rahmen einer Studienarbeit am KIT untersucht [1]. In dieser Arbeit wurde analysiert, welche Nutzerdaten Drittanbieter durch eine App erhalten können, welche Berechtigungen dafür vom Nutzer eingeholt werden, welche darüber hinaus gehende Rechte einer App eingeräumt werden können und wie Nutzer über die Weitergabe ihrer Daten informiert werden. Dieser Artikel reflektiert die Ergebnisse der Studienarbeit und gibt einen Einblick in die aktuelle Situation um die Privatsphäre der Nutzer von OSN Apps.

Viele Online Social Networks (OSNs) bieten die Möglichkeit, den Nutzern des Netzwerks Apps zur Verfügung zu stellen. Selbst externe Entwickler, im Folgenden Dritte genannt, können so eigene Anwendungen über eine Schnittstelle (engl. Application Programming Interface, API) in die Netzwerkoberfläche integrieren. Facebook stellt dafür die so genannte Graph API¹ zur Verfügung. Andere Anbieter sozialer Netzwerke, wie beispielsweise MySpace, hi5, die VZ-Netzwerke (zum Beispiel StudiVZ und MeinVZ) und Bebo, verwenden die von Google entwickelte API OpenSocial². Durch diese Schnittstellen können die Netzwerk-Betreiber selbst und insbesondere Dritte das OSN-Angebot erweitern und den Mitgliedern zusätzliche Features bieten. Auch die Drittanbieter profitieren von dieser Möglichkeit, da sie Apps als Werbemittel, finanzielle Einnahmequelle und zur Festigung der Kundenloyalität für eine Marke, ein Produkt oder ein Unternehmen nutzen können. Die Apps können von allen Mitgliedern des OSNs verwendet werden. Da Apps den Nutzern in Form von Spielen oder Ähnlichem zur Unterhaltung und als Freizeitbeschäftigung dienen, erfreuen sie sich großer Beliebtheit³.

Grundsätzlich hat jeder Nutzer die Möglichkeit, Apps für das von ihm verwendete Netzwerk selbst zu entwickeln. Je nach Netzwerk stehen dem nur mehr oder weniger leicht überwindbare Hürden entgegen. Bei den VZ-Netzwerken ist beispielsweise eine Bewerbung als Entwickler notwendig. Sobald sich ein Mitglied erfolgreich beworben hat, erhält es als Entwickler Zutritt zur Entwicklungsumgebung (Sandbox) der VZ-Netzwerke. Bevor eine entwickelte App für die anderen Nutzer des Netzwerkes zur Verfügung gestellt wird, muss sie eine mehrstufige Prüfung durch das OpenSocial-Team durchlaufen. Bei Facebook kann dagegen jeder Nutzer Apps entwickeln, dafür muss lediglich die Facebook-App „Entwickler“ zu den verwendeten Anwendungen hinzugefügt werden. Anschließend besteht die Möglichkeit auf die Entwicklerseiten von Facebook zuzugreifen und eigene Apps für das Netzwerk zu erstellen. Ein derart offener Zu-

gang zur App-Entwicklung birgt offensichtlich auch ein hohes Potenzial zum Missbrauch, da Dritte Apps entwickeln könnten, um gezielt Daten der Nutzer zu sammeln. Dem steht entgegen, dass manche Apps bestimmte Daten über den Nutzer benötigen, um überhaupt korrekt ausgeführt werden zu können. Beispielsweise braucht eine App, die einem Nutzer Sehenswürdigkeiten, Restaurants oder ähnliches in dessen näherer Umgebung anzeigt, gegebenenfalls die aktuelle Lokation des Nutzers, damit sie korrekt ausgeführt werden kann.

Damit Apps auf personenbezogene Daten zugreifen können, benötigen sie entsprechende Berechtigungen. Diese können den Zugriff auf bestimmte Daten des Nutzers, aber auch Schreib- und Leserechte zum Beispiel auf die so genannte OSN-Pinnwand oder die OSN-internen E-Mails umfassen. Die benötigten Berechtigungen müssen durch die App beim Nutzer angefragt werden. Dies erfolgt über ein netzwerkspezifisches Genehmigungsverfahren. Facebook verwendet hierfür die so genannte „Genehmigungsanfrage“. Das Genehmigungsverfahren informiert den Nutzer darüber, auf welche Daten die App zugreifen möchte bzw. welche Berechtigungen sie benötigt. Nur wenn der Nutzer beim Genehmigungsverfahren der Weitergabe der gelisteten Daten und der Einräumung angeforderter Berechtigungen zustimmt, kann die App verwendet werden.

Bei Facebook werden im Genehmigungsverfahren sämtliche Berechtigungen (teilweise in aggregierter Form) aufgelistet, die für die Verwendung der App benötigt werden. Hierbei kann es sich um den Zugriff auf Profilinformationen handeln oder um Rechte wie Lese- und Schreibzugriffe, die für bestimmte Aktionen einer App, wie beispielsweise das Posten von Beiträgen auf die Pinnwand des Nutzers durch die App, benötigt werden. Der Nutzer kann hier entscheiden, ob allen Zugriffs- und Berechtigungswünschen zugestimmt wird oder nicht, was in den meisten Fällen zur Folge hat, dass eine App nicht genutzt werden kann. Nutzer haben in diesem Zustimmungsprozess jedoch keinen Einfluss darauf, welche konkreten Daten an den Drittanbieter der App weitergegeben werden, denn mit der Zustimmung des Nutzers kann die App direkt auf die entsprechenden Profilinformationen des Nutzers zugreifen. Ändern sich die Daten oder kommen neue hinzu und wurden bei der ersten Verwendung einer App Zugriffsrechte eingeräumt, kann die App und damit dessen Betreiber auch die neuen Daten einsehen.

Es bleibt die Frage, welche Daten einem Drittanbieter durch die Verwendung einer App zugänglich gemacht werden. Jede App, die bei Facebook angeboten wird, fordert min-

¹ <https://developers.facebook.com/docs/reference/api/>

² <http://opensocial.org/>

³ Vgl. <http://www.appdata.com/>

destens den Zugriff auf die allgemeinen Informationen des Nutzers. Diese allgemeinen Informationen beinhalten den Namen, das Profilbild, das Geschlecht, die Netzwerke, die Nutzerkennnummer, die Freundesliste des Nutzers und alle anderen Informationen aus dem Profil des Nutzers, die öffentlich zugänglich sind. Diese Berechtigung wird in der Genehmigungsanfrage jeder App angezeigt, da sie von Facebook standardmäßig eingebunden wird. Für weitere Daten, wie beispielsweise Geburtstage, Wohnorte oder Interessen, werden spezielle Genehmigungen verlangt. Der Entwickler muss hierfür sowohl die Anfrage zu einem erforderlichen Attribut sowie die Berechtigung zum Zugriff auf dieses Attribut im Code der App einbinden. Auf diese Weise kann grundsätzlich auf alle Daten zugegriffen werden, die ein Nutzer bei Facebook eingestellt hat. Dies beinhaltet, neben dem Zugriff auf sämtliche Profilinformatoren, den Zugriff auf Fotoalben und Videos des Nutzers, so genannte „CheckIns“ (aktuelle Ortsangaben), Veranstaltungen, Gruppen, in denen der Nutzer Mitglied ist, etc. Dabei spielt es keine Rolle, welche Daten auf Facebook öffentlich oder nur innerhalb einer Gruppe von Facebook-Freunden geteilt wurden. Apps, denen entsprechende Berechtigungen eingeräumt werden, erhalten potenziell auch Zugriff auf Daten, die ursprünglich nur innerhalb eines ausgewählten Kreises von Nutzern geteilt wurden. Auch wenn sich viele Apps auf die für die Ausführung der App relevanten Berechtigungen beschränken – was zum Beispiel Facebook in den AGBs explizit von den App-Entwicklern fordert – gibt es eine Reihe von Apps, die eine auffällig große Menge an Daten einfordern, um ihre Nutzung zu gewähren.

Apps können – neben dem Zugriff auf Profilinformatoren – weitere Berechtigungen einfordern. Diese Berechtigungen sind Lese- oder Schreibrechte. Sehr beliebt bei Apps ist beispielsweise die Berechtigung, im Namen des Nutzers Statusmeldungen, Notizen, Fotos und Videos veröffentlichen zu können. Darüber hinaus gibt es eine große Anzahl an so genannten erweiterten Berechtigungen. Eine Berechtigung ermöglicht beispielsweise das Lesen von privaten Nachrichten des Nutzers. Mit anderen Berechtigungen kann die App dem Nutzer E-Mails bzw. SMS-Nachrichten zukommen lassen. Eine App kann CheckIns im Namen des Nutzers veröffentlichen oder den Nutzer in einen Chat einloggen, wenn sie die entsprechende Berechtigung durch die Zustimmung des Nutzers besitzt. Auch das Erstellen und Bearbeiten von Freundeslisten für den Nutzer durch die App ist möglich.

Neben den Daten über den Nutzer können auch Daten über die Freunde des Nutzers durch die App weitergegeben werden. Beispielsweise fragt die App „Mein Kalender - Geburtstag“, die einem Nutzer einen Kalender mit den Geburtstagen der eigenen Facebook-Freunde bereitstellt und entsprechend an Geburtstage erinnert, den Nutzer nach den Geburtstagen von dessen Facebook-Freunden. Stimmt der Nutzer dieser Anfrage zu, so werden die Geburtstage der Facebook-Freunde weitergegeben, ohne dass diese jedoch darüber informiert werden oder situationsabhängig Einfluss nehmen können. Diese Weitergabe ist nicht nur für den Geburtstag eines Freundes möglich, sondern für viele weitere Informationen wie beispielsweise den Beziehungsstatus, Interessen, Wohnorte, Fotos und Statusmeldungen, die so

an Dritte weitergegeben werden können, sofern dem Nutzer der App die entsprechenden Informationen von dessen Facebook-Freunden zur Verfügung stehen, d.h. dass sie für ihn im Profil des Freundes sichtbar sind. Teilt demnach ein beliebiger Facebook-Nutzer A eine Information, beispielsweise ein Foto, und nutzt einer von dessen Facebook-Freunden (Nutzer B) eine App, welche von diesem Facebook-Freund (Nutzer B) die Berechtigung einfordert, auf die Fotos von dessen Facebook-Freunden zugreifen zu dürfen, so erhält die genutzte App Zugriff auf das von Nutzer A geteilte Foto, ohne dass dieser darüber in Kenntnis gesetzt wird oder gar selbst die betreffende App benutzt.

Facebook-Nutzer können diese Weitergabe persönlicher Daten durch Freunde an Dritte unterbinden, indem sie in den Privatsphäre-Einstellungen unter dem Punkt *Apps im Bereich Von anderen Nutzern verwendete Apps* die entsprechenden Haken entfernen. Die Standard-Einstellung durch Facebook erlaubt hier die Weitergabe der eigenen Daten durch Freunde. Untersuchungen zufolge ist einem Großteil der Nutzer weder diese Form der Weitergabe eigener Daten durch Facebook-Freunde an App-Anbieter bewusst, noch ist bekannt, wie diese Weitergabe unterbunden werden kann [2]. Weitere Informationen zum Thema der potenziell unerwünschten Weitergabe von personenbezogenen Daten durch die Nutzung sozialer Netzwerke finden sich in den Quellen [2] und [3].

Heike Hennig, Dr. Sebastian Labitzke

Referenzen:

- [1] Heike Hennig; Analyse von APIs Sozialer Netzwerke, Studienarbeit am Karlsruhe Institute of Technology (KIT), 2012
- [2] Sebastian Labitzke; Avoiding Unintended Flows of Personally Identifiable Information – Enterprise Identity Management and Online Social Networks, KIT Scientific Publishing, Dissertation 2013
- [3] Irina Taranu, Sebastian Labitzke, Hannes Hartenstein; Zwischen Anonymität und Profiling: Ein technischer Blick auf die Privatsphäre in sozialen Netzwerken, In: Hannelore Bublitz, Irina Kaldrack, Theo Röhle und Mirna Zeman (Hg.), Automatismen - Selbst-Technologien, Wilhelm Fink, ISBN 978-3770554256, 2012

Facebook Apps: potential threats to privacy

Today's popular Online Social Networks (OSNs) are used by millions of people worldwide. For participation, the users share many pieces of personally identifiable information. In order to ensure that the users' shared data cannot unintentionally be accessed by those who are not intended to see the information, users apply more and more so-called privacy settings provided by the OSNs. However, the basis for an adequate usage of those privacy settings implies a comprehensive understanding of the potential flows of personally identifiable information. In particular, the article reconsiders the usage of third party applications that are integrated into OSNs and can lead to privacy leaks, i.e., unintended data flows being not clearly evident to the users.

Dissertation

Avoiding Unintended Flows of Personally Identifiable Information

Enterprise Identity Management and Online Social Networks

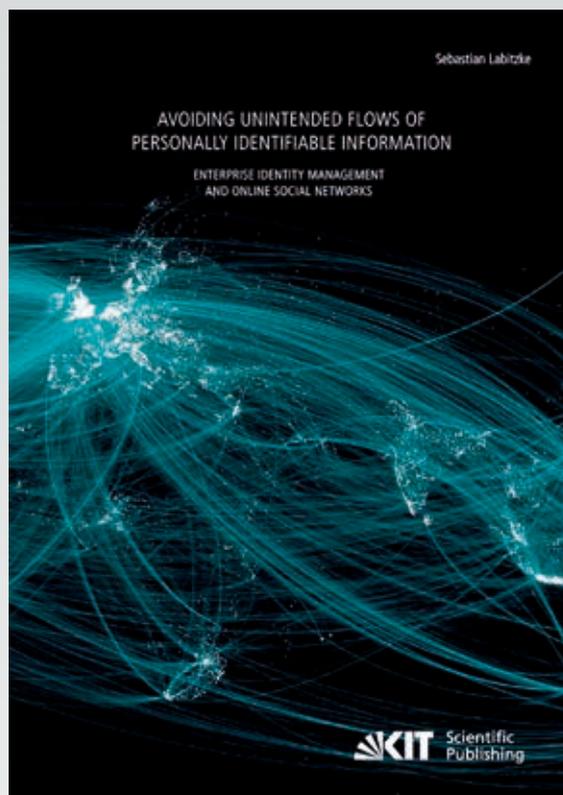
Today's online IT services are offered more and more ubiquitously. However, many of these services can only be used if they are provided with personally identifiable information (PII) either by the users themselves or another service that makes the information available. IT service providers make use of this PII to perform access control decisions or to provide the service at all. Although users can often adjust certain settings to influence the accessibility or forwarding of PII, a significant number of them are not aware of the risks, e.g., privacy risks, combined with certain possible flows of PII. Hence, there is often a lack of understanding of the implications of PII flows that, in turn, would constitute an essential basis to adjust provided settings adequately. In particular, in the context of Online Social Networks (OSNs), such inappropriately adjusted settings induce unintended PII flows to third parties.

Since those third parties can make use of this PII to, for instance, create comprehensive digital images of a particular user (i.e., profiling), shared PII poses privacy risks and can induce damage. Therefore, the main research questions addressed in this dissertation are: How can the unintended proliferation of PII be quantified? How can developers and administrators of an enterprise environment, as well as users within an OSN environment be supported to control and monitor existing unintended data flows and how can they avoid unintended flows of PII before their occurrence? Furthermore, the thesis addresses which pieces of personally identifiable information can how often be gathered, correlated, or even predicted (if not accessible) by third parties to be used for their (possibly illegal) business.

In light of the aforementioned research questions, the goals of the dissertation are twofold: On the one hand, components in enterprise environments that constitute a basis to integrate IT services, i.e., enterprise identity management systems, are investigated. On the other hand, OSNs and the users' behavior regarding publicly sharing of information are analysed in order to

quantify the mass of data available to the public and to identify corresponding privacy risks. For both areas of research, i.e., enterprise identity management and OSNs, initially PII that can potentially be accessed by third parties in an unintended manner is identified. Furthermore, the implications of publicly shared PII are investigated and, finally, implemented measures to avoid unintended PII flows are introduced.

Dr. Sebastian Labitzke



Avoiding Unintended Flows of Personally Identifiable Information – Enterprise Identity Management and Online Social Networks

Labitzke, Sebastian

KIT Scientific Publishing, Dissertation 2013

<http://digbib.ubka.uni-karlsruhe.de/volltexte/1000036761>



Bildquelle: Paul Butler Facebook

Dissertation

„Unerwünschte Flüsse personenbezogener Daten“

Online IT-Dienste sind allgegenwärtig, können jedoch oft nur dann verwendet werden, wenn der Nutzer personenbezogene Daten preisgibt beziehungsweise diese Daten den Diensten zur Verfügung stehen oder gestellt werden. Anbieter von IT-Diensten nutzen personenbezogene Daten, um Zugriffsentscheidungen zu treffen oder um einen Dienst überhaupt anbieten zu können. Zwar können Nutzer bei zahlreichen IT-Diensten sogar selbst Einstellungen vornehmen, die Einfluss auf die Öffentlichkeit oder Weitergabe personenbezogener Daten haben, jedoch mangelt es ihnen oft an Bewusstsein für Privatsphäre sowie Verständnis der Prozesse und Implikationen, um mit diesen Einstellungen adäquat umgehen zu können. Insbesondere im Kontext sozialer Medien, wie etwa sozialen Online-Netzwerken (engl. Online Social Networks, OSNs) entstehen konsequenter Weise gegebenenfalls unerwünschte Datenflüsse zu Dritten.

Können Dritte die offenbarten Daten nutzen, um beispielsweise umfassende digitale Abbilder der Nutzer (auch Profile genannt) zu bilden, kann dies zu einem erheblichen Schaden für die Nutzer selbst führen. Die zentralen Fragen dieser Arbeit sind daher: Wie kann die unerwünschte Ausbreitung personenbezogener Daten quantifiziert werden und wie können Entwickler und Administratoren im Enterprise-Umfeld sowie Nutzer im OSN-Umfeld die Ausbreitung von Daten überwachen, kontrollieren und gegebenenfalls einschränken? Im Fall

existierender unerwünschter Datenflüsse interessiert ferner, welche Möglichkeiten sich für Dritte ergeben, diese Daten zu sammeln und zu korrelieren oder gar nicht preisgegebene Daten zu präzisieren.

Im Kontext der angeführten Fragestellungen sind die Ziele der hier beschriebenen Arbeit zweigeteilt. Einerseits werden jene Komponenten von IT-Infrastrukturen betrachtet, die eine Basis für die Integration von IT-Diensten darstellen, um einheitliche Zugänge zu diesen anbieten zu können. Diese Komponenten bilden zusammengefasst das so genannte „Enterprise Identity Management“. Andererseits werden OSNs und das darin beobachtbare Nutzerverhalten untersucht, um die resultierende öffentliche Präsenz von personenbezogenen Daten in OSNs zu quantifizieren und Risiken zu identifizieren. In beiden Bereichen galt es zunächst zu bestimmen, welche Daten von Dritten (potenziell ungewollt) eingesehen werden können. Des Weiteren wird untersucht, welche Auswirkungen die Offenlegung der Daten gegenüber Dritten haben kann. Schließlich werden Maßnahmen implementiert, die verhindern, dass Daten unerwünscht an Dritte weitergegeben werden bzw. den Nutzer bei der Aufgabe unterstützen, den Überblick über seine offen zugänglichen Daten zu bewahren.

Studierende entwickeln „Privatsphäre-Apps“ im Praktikum Web-Engineering

Im Praktikum Web-Engineering – der Begleitveranstaltung zur Vorlesung Web-Engineering von Dr.-Ing. Martin Nußbaumer – werden aktuelle (Forschungs-)Themen als Basis für studentische Software-Projekte herangezogen. Die Studierenden implementieren im Laufe eines Semesters Web-basierte Software mit ganz unterschiedlichen Zielen. In einem vergangenen Semester bestand die Aufgabe darin, eine Applikation (App) zu entwickeln, die in Facebook integriert werden kann. Ziel der Implementierung sollte sein, Nutzern klar vor Augen zu führen, welche Daten von sich und den eigenen Facebook-Freunden durch die Nutzung einer App in Facebook, zum Beispiel einem Online-Spiel, an den Anbieter dieser App potenziell weitergegeben werden.

Versierte Facebook-Nutzer kennen die Zustimmung, die gegeben werden muss, wenn eine Drittanbieter-App genutzt werden soll. Eine Umfrage der Forschungsgruppe Dezentrale Systeme und Netzdienste (DSN) von Prof. Dr. Hannes Hartenstein hat jedoch gezeigt, dass vielen Nutzern die Folgen der Zustimmung zur Weitergabe von Daten an Drittanbieter von Apps nicht wirklich bewusst sind.

Einerseits ist zwar das Privatsphäre-Bewusstsein der OSN-Nutzer über die vergangenen Jahre nachweislich gestiegen, jedoch ist es oft eine Herausforderung für Nutzer, die eigenen Ansprüche adäquat in die von den OSNs angebotenen Privatsphäre-Einstellungen zu überführen. Diese Einstellungen dienen der Eingrenzung des Personenkreises, der bestimmte Daten eines Nutzers über ein soziales Netzwerk einsehen darf. Die Folge sind potenziell unerwünschte Datenflüsse zu Dritten, die durch ein besseres Verständnis dieser vermieden werden könnten. Apps, die potenziell auftretende Datenflüsse deutlich demonstrieren, stellen damit die Brücke zwischen Bewusstsein für Privatsphäre und dem adäquaten Umgang mit Privatsphäre-Einstellungen dar.

Abbildung 1 zeigt einen Screenshot einer aggregierten Variante der beiden Prototypen, die von den Studierenden im Rahmen des oben genannten Praktikums implementiert wurden. Bei dieser App werden einem Nutzer zunächst ein Bild eines zufällig gewählten Facebook-Freundes sowie dazugehörige Informationen angezeigt (1). Als Aufmerksamkeitserreger „bedankt“ sich die App beim Nutzer für die (in diesem Fall nicht wirklich vollzogene) Weitergabe der Daten dieses spezifischen Facebook-Freundes. Ferner werden Fotos mit poten-

ziell prekären Inhalt angezeigt (2), Facebook-Freunde auf einer Landkarte visualisiert (3), nicht angegebene Daten der Nutzer auf Basis der Daten von dessen Facebook-Freunden versucht, zu präzisieren (4) sowie eine statistische Übersicht angezeigt, die demonstriert, wie viele Daten die App potenziell durch ihre Nutzung vom Facebook-Nutzer und dessen Freunden hätte abgreifen können (5).

Die Studierenden haben für die entstandenen Prototypen viel kreative Arbeit geleistet und die postulierten Erwartungen weit übertroffen. Für die wertvollen Beiträge bedankt sich die Forschungsgruppe DSN bei Maximilian Brunner, Benedikt Dahm, Younes Daroussi, Micha-Jamie Guthmann, Alexander Groß, Lukas Lampe, Tobias Nedeljov, Su Qu, Sebastian Stehle, Jing Sun, Bodo Vossen und insbesondere Alexander Wolf, der die Prototypen in eine aggregierte Form gebracht hat, um damit im Sinne der Privatsphäre-Forschung weiter arbeiten zu können.

Letztendlich scheinen solche Apps für Nutzer sehr hilfreich zu sein, jedoch bestehen auch Hürden zum Anbieten für ein breites Publikum aufgrund des sehr hohen Missbrauchspotenzials einer solchen App und rechtlicher Einschränkungen. Es besteht aber Zuversicht, dass diese Art von Nutzer-Unterstützung in Zukunft verstärkt angeboten wird, um Datenflüsse in sozialen Medien besser nachvollziehen zu können. Dieses Verständnis bietet dann wiederum eine essentielle Grundlage zum adäquaten Umgang mit Privatsphäre-Einstellungen in sozialen Netzwerken.

Matthias Keller, Holger Kühner, Dr. Sebastian Labitzke

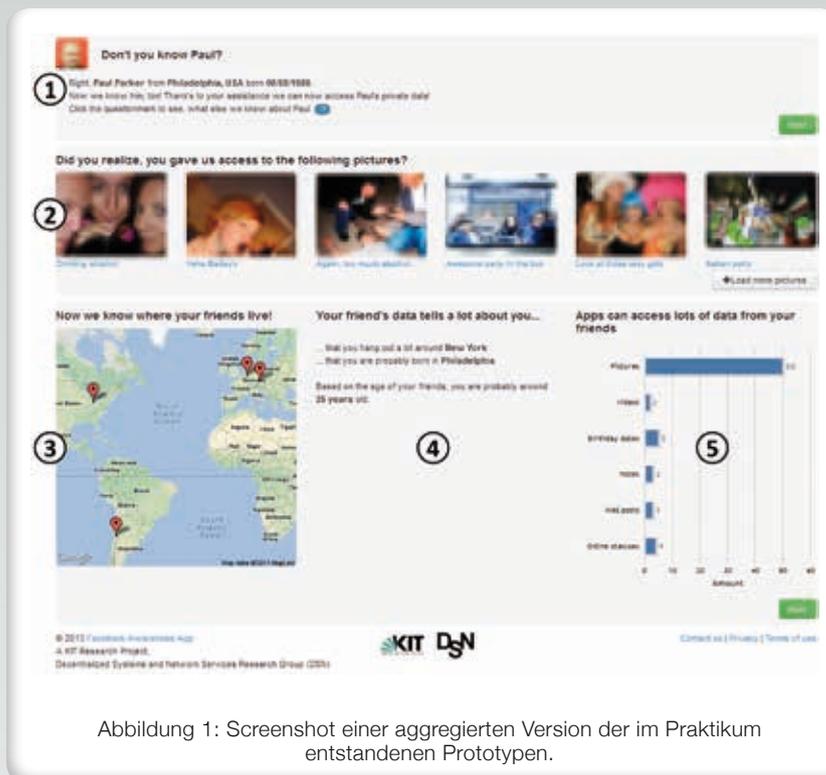


Abbildung 1: Screenshot einer aggregierten Version der im Praktikum entstandenen Prototypen.

Students develop “privacy apps”

In the context of the practical course web-engineering, students have developed so-called privacy applications that can be integrated into Online Social Networks (OSNs), i.e., applications aiming at supporting users in understanding potentially unintended flows of personally identifiable information that can occur. The solutions designed are based on a novel approach to demonstrate users their current situation regarding privacy.

Elektronischer Rechtsverkehr DFG-Projekt „BeLab“ – Konzepte für das beweissichere elektronische Laborbuch

Das Datenmanagement und die damit verbundene Langzeitarchivierung von Forschungsdaten stellen eine Reihe von Herausforderungen dar, unter anderem wie beispielsweise der Verdacht der Datenmanipulation vermieden werden kann. Im DFG-Projekt „Beweissicheres elektronisches Laborbuch (BeLab)“ entwickelte eine interdisziplinäre Projektgruppe aus Physikern, Informatikern und Juristen Konzepte für die beweiswerterhaltende Archivierung elektronischer Forschungsdaten.

Nach den Standards der guten wissenschaftlichen Praxis müssen Forschungsprozesse ausreichend und nachvollziehbar dokumentiert werden. Genutzt werden kann dazu beispielsweise ein Laborbuch. Da die elektronischen Datenmengen enorm ansteigen, wird in zunehmendem Maße auch die Dokumentation elektronisch durchgeführt. Elektronische Laborbücher bieten neben einer einheitlichen Datenverwaltung weitere Vorteile gegenüber einer Dokumentation aus Papier. So ist das Suchen und Teilen von Daten wesentlich effektiver und leichter zu realisieren. Die elektronische Dokumentation bringt jedoch auch Nachteile. Daten können leicht manipuliert werden und zwar auf eine Weise, die nur schwer bis überhaupt nicht nachweisbar ist. Der Nachweis, dass die Daten unverändert vorliegen, muss jedoch nicht nur im Forschungsprozess erbracht werden, sondern auch in der abschließenden Phase der Archivierung über die entsprechenden Aufbewahrungspflichten hinaus.

In der ersten Phase des Projekts BeLab (Februar 2010 bis Januar 2012) wurde ein Konzept für die beweissichere elektronische Langzeitarchivierung von Forschungsdaten entwickelt und prototypisch umgesetzt. Dazu wurde der Prozess der Erhebung und Archivierung von Forschungsprimärdaten analysiert und betrachtet, wie die Korrektheit und Vollständigkeit der Daten durch Transparenz von Prozessen und Dokumentation gewährleistet werden können. Darüber hinaus wurde untersucht, welche Rechtsgüter (zum Beispiel Urheberrecht, Datenschutzrecht) und Gesetze bei der Erhebung und Archivierung zu beachten sind, damit eine rechtskonforme Gestaltung des Konzepts und des Prototypen sichergestellt werden kann. Das Konzept umfasst elektronische Verfahren, mit denen die Integrität, Authentizität und Interpretierbarkeit der Daten dauerhaft so abgesichert werden kann, dass Beweissicherheit gewährleistet ist. Daraus wurden neue Anforderungen abgeleitet, die zukünftige Archivsysteme erfüllen müssen.

Seit Februar 2012 verfolgte das Projekt das Ziel, das Konzept zu verbessern und zu erweitern sowie um Schlüsseltechnologien zur Steigerung der Beweiseignung (Beweiswertsteigerung) zu ergänzen. Das Konzept eines beweissicheren elektronischen Laborbuchs wurde dazu über die Archivierung hinaus auf den gesamten Scientific Data Lifecycle ausgeweitet. Außerdem wurde untersucht, wie elektronische Signaturen und Zeitstempel, die Identitäts- und Signierfunktion des neuen Personalausweises

sowie automatisiert elektronisch signierende Laborgeräte in das Konzept integriert und im Forschungsprozess eingesetzt werden können.

In mehreren Workshops wurden die bis dahin erzielten Ergebnisse vorgestellt und gemeinsam mit Wissenschaftlern aus unterschiedlichen Disziplinen und Entwicklern von elektronischen Laborbuchsystemen diskutiert. Neben weiteren gezielt durchgeführten Interviews werden zum Abschluss des Projekts (Januar 2014) darüber hinaus Simulationsstudien durchgeführt. Diese dienen dazu, die entwickelten Ergebnisse und den umgesetzten Prototypen abschließend unter möglichst realen Bedingungen technisch und juristisch zu evaluieren.

Ziel des Projekts ist es, die Forderung der DFG nach Verbesserung des Umgangs mit elektronischen Forschungsdaten im Hinblick auf Sicherung, Aufbewahrung und nachhaltige Verfügbarkeit aufzugreifen und Antworten zur praxistauglichen Umsetzung im Forschungsprozess zu geben. Im aktuell erschienenen Buch „Beweissicheres elektronisches Laborbuch“ präsentieren Prof. Dr. Bernhard Neumair und Jan Potthoff vom SCC sowie Prof. Dr. Alexander Roßnagel und Rechtsanwalt Paul C. Johannes von der Universität Kassel und Prof. Dr. Siegfried Hackel und Moaaz Madiesh von der Physikalisch Technischen Bundesanstalt (PTB) die Ergebnisse des von der DFG geförderten Forschungsprojekts. Belegt wird, dass die beweiswerterhaltende Sicherung von elektronischen Forschungsdaten keinem Selbstzweck dient, sondern sowohl dem einzelnen Forscher als auch der Scientific Community zu Gute kommt. Das Buch zeigt auch auf, wie diese Ziele rechtsverträglich erreicht und mit welchen Techniken sie umgesetzt werden können.

Jan Potthoff, Paul C. Johannes



Johannes/Potthoff/Roßnagel/Neumair/Madiesh/Hackel: *Beweissicheres elektronisches Laborbuch - Anforderungen, Konzepte und Umsetzung zur langfristigen, beweiswerterhaltenden Archivierung elektronischer Forschungsdaten und -dokumentation*.

Reihe: *Der elektronische Rechtsverkehr*, Band 29, Nomos Verlag, Baden-Baden 2013, 246 S.

www.nomos-shop.de/21361

DFG project “BeLab” – concepts for the probative electronic laboratory notebook

Electronic laboratory notebooks (ELN) offer many advantages in contrast to documentation on paper. But they have the disadvantage that changes in digitally stored data can be undetectable. Within the DFG project “BeLab” (probative electronic laboratory notebook) an interdisciplinary workgroup analysed how accessibility, completeness, integrity, authenticity, readability and interpretability of ELNs can be ensured in the long term. Physicists, computer scientists and jurists examined together, how probative and sustainable long-term archiving of digital primary research data can be realised. Their findings were analysed in terms of technical feasibility as well as compliance with user requirements and with the legal framework. Concepts and design information for the development of probative ELN have now been published in the above mentioned book.

Monitoring-Umgebung am SCC wird vereinheitlicht

Das SCC stellt für die Einrichtungen des KIT zentrale IT-Dienste wie beispielsweise E-Mail zur Verfügung. Um eine hohe Verfügbarkeit dieser Dienste sicher zu stellen, ist eine Überwachung der Funktionalität der für diese Dienste relevanten Komponenten, unter anderem Applikationen und Systeme, notwendig, um zeitnah Störungen feststellen und darauf reagieren zu können. Entsprechende Überwachungsmechanismen sind bereits in der Vergangenheit verwendet worden. Allerdings wurden in Abhängigkeit von den überwachten Diensten parallel mehrere, zum Teil ähnliche Überwachungs Umgebungen betrieben. Diese werden nun Schritt für Schritt zusammengeführt, um eine einheitliche Monitoring-Umgebung zu schaffen.

Im Idealfall können Probleme bereits erkannt werden, bevor ein Dienst für den Benutzer ausfällt. Dazu müssen Überwachungswerkzeuge (Monitoring Tools) die kritischen Komponenten mit den richtigen Schwellwerten überwachen. Dieser ideale Zustand lässt sich wohl nur in der Theorie erreichen, denn die Schwellwerte oder die kritischen Komponenten können sich mit jeder neuen Version eines Produktes ändern. Trotzdem sollte man versuchen, sich diesem Ideal so weit wie möglich anzunähern.

Die Überwachung muss einen Ausfall identifizieren und den richtigen Personenkreis für die Behebung des Problems benachrichtigen. Der Grund für den Ausfall eines Dienstes ist nicht immer in den Komponenten des Dienstes selbst lokalisiert. Oft sind es andere Dienste oder Komponenten, von denen dieser Dienst wiederum abhängig ist. Diese Abhängigkeiten müssen in einem guten Monitoring ebenfalls abgebildet werden können. Dies setzt aber auch voraus, dass Informationen über

den Zustand der relevanten Komponenten, die möglicherweise durch unterschiedliche Monitoring Tools überwacht werden, zusammengeführt werden müssen.

Im SCC wurden in der Vergangenheit parallel mehrere Monitoring-Umgebungen betrieben. Diese werden nun nach und nach zusammengeführt, um eine einheitliche Monitoring-Umgebung zu schaffen. Abbildung 1 zeigt am Beispiel der zentralen Systeme für den Maildienst stark vereinfacht die Struktur der neuen Überwachungs Umgebung. Einige Aspekte sind derzeit noch in der Realisierungsphase.

In Abbildung 1 sind die beiden relevanten Teilumgebungen der neuen Umgebung mit den Produkten *Icinga* und *SCOM* dargestellt, wobei das zentrale Element ein Icinga-System (Icinga-Master) ist. Über dieses System werden die Benachrichtigungen über Zustandsänderungen versendet. Dieses aus *Nagios* hervorgegangene Überwachungswerkzeug ist Open-Source-basiert und bietet alle Möglichkeiten, die an ein gutes Werkzeug gestellt werden. In den bisherigen Monitoring-Umgebungen des SCC waren entweder *Nagios* oder bereits *Icinga* im Einsatz, so dass keine Probleme beim Übergang zu erwarten waren. Beispielsweise werden im Grid Computing Centre Karlsruhe (GridKa) ca. 30.000 Messstellen erfasst.

Mit *Icinga* können sowohl Linux- als auch Windows-Systeme überwacht werden. Für Windows-Systeme wird ergänzend das Produkt *System Center Operations Manager* (SCOM) von Microsoft verwendet und an das zentrale Icinga-System gekoppelt. Auch dieses Produkt (SCOM 2007) war bereits im SCC im Einsatz. Hintergrund dafür ist, dass Microsoft über die *Windows Management Instrumentation* (WMI) eine Implementierung des *Common Information Model* (CIM) bietet, welche die Überwachung vielfältiger Parameter, beispielsweise in Exchange-, oder SQL-Servern erlaubt, die in dieser Tiefe mit *Icinga*

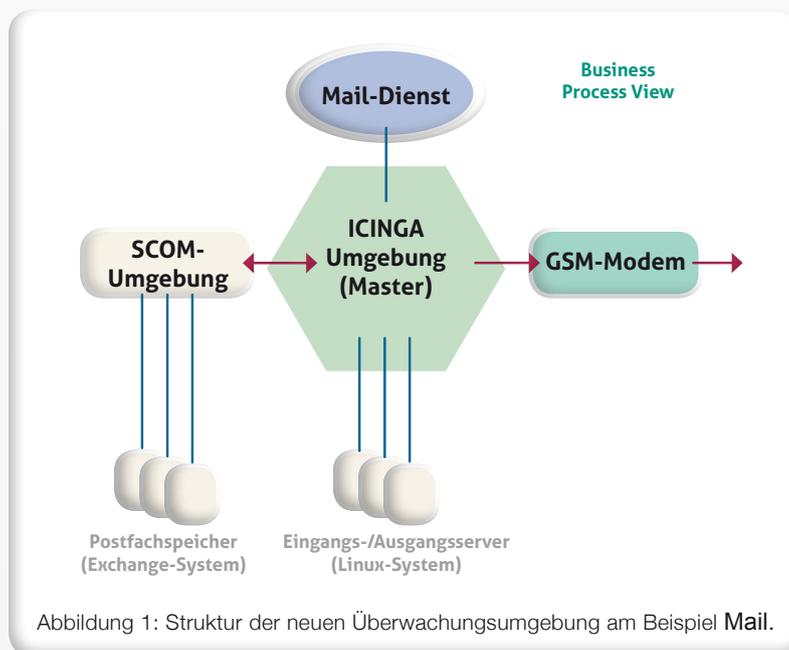
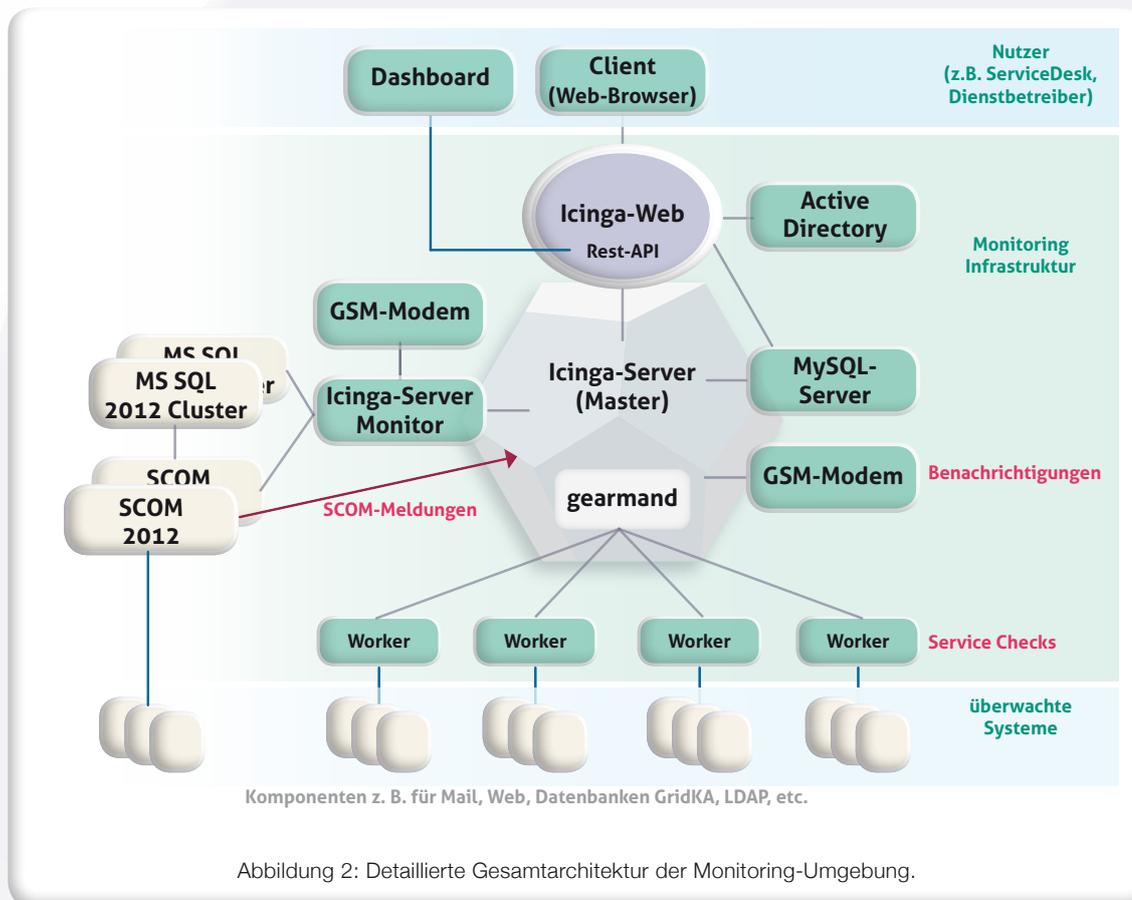


Abbildung 1: Struktur der neuen Überwachungs Umgebung am Beispiel Mail.



gar nicht oder nur schwer erfassbar wären. Da aber mit *Icinga* natürlich auch Parameter von Windows-Systemen, wie zum Beispiel Plattenkapazität oder Konnektivität überwacht werden können, kann die Zuordnung eines Systems anhand der Monitoring-Anforderungen vorgenommen werden.

Meldungen des SCOM-Systems über Zustandsänderungen werden an das Icinga-System geschickt, d.h. hier laufen alle Meldungen aus den Überwachungssystemen zusammen. Somit kann an dieser Stelle eine Gesamtsicht auf den Zustand der überwachten Komponenten, also den technischen Zustand der Dienste, bereitgestellt werden. Auf dieser Basis kann dann eine Benachrichtigung, beispielsweise per SMS, an die Rufbereitschaft erfolgen. Auf diese Weise werden auch die Benachrichtigungskreise nur an einer Stelle verwaltet.

Nutzer, zum Beispiel die Mitarbeiter des SCC-Service-Desk, sollen nicht primär mit Details über den Zustand

einzelner Systeme konfrontiert werden. Dafür wird als Abstraktionsschicht das so genannte *Business Process View Modul* eingesetzt. Damit werden die Meldungen der Systeme, die einen bestimmten Dienst betreffen, zusammengeführt, und es lässt sich eine vereinfachte Übersicht (Dashboard) zum Zustand der überwachten Dienste realisieren.

Die Überwachung wird von einer zentralen Icinga-Instanz mit einer angeschlossenen MySQL-Datenbank durchgeführt. Da das KIT mit dem GridKa eine der größten Icinga-überwachten Umgebungen in Deutschland betreibt, muss die Überwachung eine gute Skalierbarkeit bieten. Aus diesem Grund wurde für die Ausführung der eigentlichen Überprüfungen auf den Systemen (Service Checks) ein Queueing-Mechanismus zwischengeschaltet. Dieser Mechanismus benutzt die ebenfalls frei verfügbare Software *Gearman* um die Monitoring-Last auf verschiedene Rechner (so genannte Worker) zu verteilen. Im Moment sind für GridKa zwei Worker und für die weiteren

IT-Dienste des SCC ein dritter Worker installiert und in Betrieb. Ein Vierter wird demnächst in Betrieb genommen.

Das Master-System kann, wie oben bereits dargestellt wurde, mit einem angeschlossenen GSM-Modem direkt SMS verschicken und bietet darüber hinaus eine Web-Schnittstelle für die Dienste-Betreiber um den aktuellen Zustand der überwachten Komponenten zu visualisieren. Eine Authentifizierung der Nutzer erfolgt hierbei gegen das KIT Active Directory.

Nun liegt es in der Natur der Sache, dass Software und Hardware Fehler produzieren können. Dementsprechend wird die Icinga-Umgebung durch eine zweite, kleinere Icinga-Instanz überwacht. Sollten also Probleme im Monitoring-Umfeld festgestellt werden, kann diese zweite Instanz die entsprechende Benachrichtigung versenden. Dazu ist der Rechner ebenfalls mit einem GSM-Modem ausgestattet. Somit wird ein hohes Maß an Ausfallsicherheit gewährleistet.

Letztendlich ist man beim Verschicken einer SMS auch von einem Provider abhängig. Deshalb wird zwischen den Icinga-Instanzen auch regelmäßig die Funktionalität des SMS-Verkehrs getestet. Natürlich gibt es auch in dieser Umgebung Komponenten, die einen teilweisen oder kompletten Ausfall der Überwachung herbeiführen können. Aber diese alle redundant auszulegen, würde ein zu hohes Maß an Komplexität und Kosten verursachen.

Die SCOM-Umgebung umfasst zwei Überwachungsknoten und einen angeschlossenen MSSQL-Cluster, um ebenfalls eine hohe Verfügbarkeit sicherzustellen. Die Regelwerke für die überwachten Windows-Systeme sind auf beide SCOM-Instanzen verteilt, auf den überwachten Komponenten sind SCOM-Agenten installiert.

Ziel der Zusammenführung ist eine konsolidierte, vereinfachte Struktur. Insbesondere wird damit die Anzahl der „vollwertigen“ Icinga-Systeme stark reduziert und auf diese Weise auch der Administrationsaufwand verringert. Die Struktur wurde so angelegt, dass sie zum einen flexibel genug ist, um unterschiedliche Monitoring-Anforderungen zu unterstützen, zum anderen aber auch die notwendige Skalierungsfähigkeit aufweist.

Die Überführung der „alten“ Umgebungen in die neue Struktur ist jedoch bei weitem noch nicht abgeschlossen. Bisher überwachte Komponenten und ihre Schwellwerte müssen auf den aktuellen Stand gebracht werden, so dass die alten Konfigurationen nicht einfach „Eins zu Eins“ übernommen werden können.

Derzeit wird ein aktuelles Regelwerk speziell für die Exchange-Server der Mailumgebung erstellt, ebenso wird noch an der Kopplung der SCOM- und Icinga-Umgebung für Benachrichtigungen gearbeitet. Für Web-, Datenbank- sowie GridKa-Systeme ist die Icinga-Überwachung aber bereits produktiv.

Axel Jäger, Dr. Jens-Michael Milke, Klaus Scheibenberger

Monitoring environment at SCC will be standardised

SCC is the central IT service provider for the organisational units of KIT. To ensure a high level of service availability, monitoring of the relevant components' functionality, e.g. applications and systems, is indispensable in order to quickly detect malfunctions and trigger necessary reactions. Such monitoring mechanisms were already used in the past. But due to organisational edge conditions dependent on special services, parallel monitoring structures were operated. These parallel structures will now be gradually consolidated in order to create a unified monitoring environment.



„Simulierte Welten“ für Preis der Robert Bosch Stiftung nominiert

Das vom Ministerium für Wissenschaft, Forschung und Kunst geförderte Projekt „Simulierte Welten“ wurde gemeinsam mit sieben anderen Initiativen von der Robert Bosch Stiftung für den renommierten Preis „Schule trifft Wissenschaft“ nominiert, der im Dezember 2013 in Berlin vergeben wird.

Die moderne Welt ist ohne Simulationen kaum mehr vorstellbar: Autos und Flugzeuge können ressourcensparend entwickelt werden, neue Medikamente werden am Computer modelliert und getestet und Klimavorhersagen aufgrund komplexer Modelle verlässlicher. Diese und andere Herausforderungen der Gegenwart verlangen nach immer größerer Rechenkraft, welche nur durch das Zusammenschalten vieler Computer zu erreichen ist. Kaum eine große technische Entwicklung kommt heutzutage mehr ohne die Nutzung von Techniken des Hochleistungsrechnens (High Performance Computing, HPC) aus.

Das Projekt hat sich daher zum Ziel gesetzt, Schülerinnen und Schülern in Baden-Württemberg die Chancen und Risiken des Hochleistungsrechnens sowie die Reichweite der Entwicklungen im Bereich der computergestützten Simulation zu vermitteln. Das Vorhaben wird gemeinsam vom SCC, dem Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart sowie dem Institut für Sozialwissenschaft der Universität Stuttgart getragen und arbeitet bereits mit fünf Schulen in Baden Württemberg zusammen.

In Seminaren, Science Cafés, Abendvorträgen und auch durch persönliches Coaching erhalten Schülerinnen und Schüler sowie andere Interessierte einen Einblick in diese komplexe Materie. Selbst programmierte Billard- und Minigolfspiele ermöglichen es ihnen dabei, Theorie und Praxis in eigenen Versuchen zu vergleichen und so neben den Chancen auch die Risiken großer Simulationen besser zu verstehen. Aus der Lehrerschaft stammende „HPC Ambassadors“ helfen dabei, die neu gestalteten Unterrichtseinheiten für Schüler und Lehrer gleichermaßen zugänglich zu machen. Die fertigen Materialien stehen Lehrern danach über das E-Learning System ILIAS zur freien Verfügung.

Nähere Informationen zum Projekt sind unter <http://www.simulierte-welten.de> erhältlich. Für weitere Fragen rund um „Simulierte Welten“ stehen die Koordinatoren des Projekts zur Verfügung. Gerne werden auch Kontakte zu den beteiligten Gymnasien hergestellt.

(red)

Kontakt:

Thomas Gärtner, SCC
E-Mail: thomas.gaertner@kit.edu
Tel.: 0721 608 47705

Jörg Hilpert, Institut für Sozialwissenschaft /
Universität Stuttgart
E-Mail: joerg.hilpert@sowi.uni-stuttgart.de
Tel.: 0711 685 84539



2. Dezember 2013:
„Simulierte Welten“
nimmt den mit
20.000 € dotierten
2. Preis der
Robert-Bosch-Stiftung
in Berlin entgegen.



Dr. Almut Zwölfer vom Schelztor-Gymnasium in Esslingen und Thomas Gärtner vom SCC bei der Präsentation des vom MWK geförderten Projekts „Simulierte Welten“ im September 2013 in der Repräsentanz der Robert Bosch Stiftung in Berlin.
Foto: SCC

“Simulated Worlds” nominated for award of the Robert Bosch Foundation

The project “simulated worlds” funded by the Ministry of Science, Research and the Arts of the State of Baden-Wuerttemberg has been nominated for the renowned award “School Meets Science” of the Robert Bosch Foundation. The project, in which also SCC is involved, aims at promoting the understanding of scholars for simulation and the associated topic high performance computing. The winners of the eight nominated initiatives will be announced in Berlin in December 2013.

Datenanalyse im Fokus: Zweites internationales Big Data-Symposium am KIT

Die Menge der Daten steigt durch Experimente, Beobachtungen und Messungen in nahezu allen Wissenschaftsbereichen rasant an. Die gewaltigen Datenmengen beinhalten für die Forscher sowohl neue Möglichkeiten des Erkenntnisgewinns als auch neue Herausforderungen beim Datenmanagement und bei der Datenanalyse. Das zweite internationale Symposium „The Challenge of Big Data in Science“, das am 24. September 2013 am KIT stattfand, widmete sich dieser Thematik und stellte dabei insbesondere die Datenanalyse in den Mittelpunkt.

Auch in diesem Jahr trafen sich international führende Big Data-Experten am KIT und stellten in ihren Vorträgen sowohl Details ihrer täglichen Forschungsarbeit als auch Entwicklungstendenzen im Bereich des Datenmanagements und insbesondere der Datenanalyse vor.

Prof. Dr. Wilfried Juling, Chief Science und Information Officer des KIT, und Prof. Dr. Achim Streit, Direktor des SCC und Koordinator der Helmholtz-Portfolio-Erweiterung „Large Scale Data Management and Analysis“ (LSDMA), eröffneten das Symposium und begrüßten die rund 100 Teilnehmer aus aller Welt.

Keynote-Sprecherin Beth Plale von der Indiana University erörterte insbesondere das Spannungsfeld zwischen Open Access und Big Data. Sie hob auch die Herausforderungen hervor, die durch das exponentielle Wachstum der Daten und der gleichsam steigenden Erwartungen zur Lösung wissenschaftlicher und gesellschaftlicher Probleme auf Basis dieser wachsenden Datenmengen entstehen.

Keynote-Sprecher Sayeed Choudhury von der Johns Hopkins University referierte über Datenkonservierung und -herkunft als notwendigem Faktor der Datenanalyse. Am Beispiel der Daten des Großprojekts Sloan Digital Sky Survey stellte er Datenmanagement Services und damit verbundene Best Practices an der Johns Hopkins University vor. Um Langzeitforschung und -analysen über den kompletten Datenlebenszyklus hinaus zu unterstützen und neue Möglichkeiten zu eröffnen, seien unterschiedliche Datenmanagementschichten notwendig, erläuterte Choudhury. Es gehe hierbei allerdings nicht nur um Speicherung, Archivierung und Datenerhaltung, sondern insbesondere auch um die Pflege von Daten.

Alexander Hall von der Firma Google erklärte, mit welchen Algorithmen es möglich ist, Billionen Datensätze effizient zu analysieren. Die weiteren Vorträge drehten sich um die „Research Data Alliance“ (RDA) als interoperable Plattform für globale Forschungsdaten (Leif Laakson vom IT Center for Science, Finnland), die Entdeckung von statistischen Ausreißern in großen Datenbeständen (Klemens Böhm, KIT), digitale Archive in den Geisteswissenschaften (Peter Doorn von Data Archiving and Networked Services, Niederlande) und Crowdsourcing für Datennahme und -analyse (Sebastian Drude vom Max-Planck-Institut für Psycholinguistik).

Den Abschluss des Symposiums bildete eine Podiumsdiskussion mit den Sprechern. Neben technischen und organisatorischen Themen kristallisierten sich zwei große Herausforderungen für die Zukunft heraus: Die Aufnahme der Analyse von großen Daten in die Curricula sowie die nachhaltige Finanzierung für die Langzeitspeicherung wissenschaftlicher Daten.

Dr. Christopher Jung, Eileen Kühn

Weitere Details zu LSDMA und zum Symposium unter <http://www.helmholtz-lsdma.de>



Im Mittelpunkt des zweiten internationalen Symposiums „The Challenge of Big Data in Science“ am KIT stand das Thema „Datenanalyse“. Foto: Eileen Kühn

Focus on data analysis: second international big data symposium at KIT

On September 24th, SCC hosted the second international symposium “The Challenge of Big Data in Science”, organised by the Helmholtz Portfolio Extension „Large Scale Data Management and Analysis“ (LSDMA). More than a hundred participants from all over the world listened to keynotes by Beth Plale from Indiana University and Sayeed Choudhury from Johns Hopkins University as well as five further presentations, spanning topics from fast analysis techniques to open access and curation.

11. Internationale GridKa Summer School

Vom 26. bis 30. August 2013 richtete das SCC die 11. Internationale GridKa Summer School aus. Die GridKa School ist eine der führenden Sommerschulen für fortgeschrittene IT-Techniken in Europa. Die Schwerpunkte der Schule lagen dieses Jahr auf Cloud- und Grid-Technologien, Big Data, Effective Programming und Parallel Computing. Über 140 Teilnehmer aus aller Welt und verschiedenen Wissenschaftsdisziplinen und Wirtschaftszweigen besuchten die englischsprachigen Vorträge, Workshops und praktischen Übungen.



Auch in diesem Jahr war das internationale Interesse an fortgeschrittenen IT-Techniken groß: Die Teilnehmerinnen und Teilnehmer der GridKa School 2013 besuchten Vorträge, Workshops und praktische Übungen.
Foto: Dr. Marcus Hardt

Die diesjährige Veranstaltung wurde mit dem Vortrag "Enabling eScience" von Peter Kunszt von der ETH Zürich eröffnet. In seiner Präsentation gab Kunszt einen umfassenden Überblick auf das Big Data Management in der modernen Wissenschaft und erläuterte wichtige Herausforderungen und mögliche Lösungen. Zahlreiche weitere Vorträge informierten die Teilnehmer über aktuelle Entwicklungen in den Bereichen Big Data, moderne Grid- und Cloud-Technologien, IT-Sicherheit, Parallel Computing, Virtualisierung und Automation.

Ein weiterer Schwerpunkt des Programms waren Seminare mit praktischen Übungen. Die Seminarleiter bereiten ihre Workshops bis zu vier Monate lang vor. Sie installieren bzw. konfigurieren Hard- und Software und testen diese für den Schulungszweck. Dieses Jahr standen neben etwa 110 virtualisierten Servern des Grid Computing Centre Karlsruhe (GridKa) auch der Web Service Amazon EC2 und Grafikprozessoren des Instituts für Prozessdatenverarbeitung und Elektronik (IPE) am KIT zur Verfügung.

International arbeitet die GridKa School mit der nationalen Grid-Initiative der Schweiz (SWING), der europäischen Grid-Infrastruktur (EGI) und dem CERN OpenLab zusammen. Zahlreiche Kooperationen mit weiteren Instituten, Zentren, Projekten und Firmen bilden eine entscheidende Grundlage für die erfolgreiche Durchführung der Schule.

Auf der diesjährigen Veranstaltung wurden insgesamt 13 Kurse angeboten. Erstmals dabei waren die Workshops „Relational and Non-relational Databases“, „CUDA GPU Programming Workshop“ und „OpenStack Cloud“, die auf großes Interesse stießen und sehr gut von den Teilnehmern bewertet wurden.

Für das Bewertungssystem, mit dem alle Teilnehmer die Beiträge begutachten können, wurde dieses Jahr erstmals eine Online-Lösung eingesetzt, die zur Erhöhung der innerschulischen Interaktion erheblich beigetragen hat. Neben den Bewertungen für alle Beiträge wurden über 50 wertvolle Kommentare mit Empfehlungen und Wünschen der Teilnehmer für die nächste Veranstaltung abgegeben. Diese Informationen werden auch in die Planung und zukünftige Konzeption der Schule einfließen.

Ein besonderer Höhepunkt war der öffentliche Abendvortrag von Marek Bundzel von der Universität Kosice in der Slowakei zum Thema „Nature inspired computing“. Der Vortrag führte in die Themen neuronale Netze und Künstliche Intelligenz ein und zeigte viele Beispiele der modernen, mobilen Robotik.

Wilhelm Bühler, Dr. Pavel Weber

11th International GridKa Summer School at SCC

From 26th to 30th August 2013 SCC organised the eleventh international GridKa Summer School, one of the leading summer schools for advanced computing techniques in Europe. This year the school mainly focused on the following topics: cloud and grid technologies, big data, effective programming and parallel computing. Over 140 participants from all over the world and different fields of science and industry attended exciting plenary talks, workshops and hands on sessions.



Marek Bundzel von der Technischen Universität Kosice begeisterte die Zuhörer mit seinem Vortrag „Nature inspired Computing“.
Foto: WooJin Park

3. EMAC-Symposium am SCC

Globales Chemie-Klimamodell simuliert Atmosphäre bis in eine Höhe von 80 Kilometern

Im Juni 2013 fand das dritte jährliche EMAC-Symposium am SCC statt, auf dem international führende Experten die unterschiedlichsten Anwendungsbereiche des globalen Chemie-Klimamodells ECHAM5/MESSy Atmospheric Chemistry (EMAC) erörterten. Das Modell, das am KIT am Institut für Meteorologie und Klimaforschung (IMK) und am SCC im Simulation Lab Klima und Umwelt verwendet wird, simuliert die Atmosphäre vom Boden bis zu einem Höhenbereich von 80 Kilometern und umfasst so die Troposphäre, Stratosphäre und Mesosphäre.

EMAC enthält für die Berechnung der Meteorologie auch das „General Circulation Model ECHAM5“, welches am Max-Planck-Institut für Meteorologie in Hamburg entwickelt wurde. Mit ECHAM5 wurden unter anderem schon Simulationen für den „Climate Assessment Report des Intergovernmental Panel on Climate Change (IPCC)“ durchgeführt, der ca. alle sechs Jahre den aktuellen wissenschaftlichen Stand zum globalen Klimawandel zusammenfasst und dessen fünfte Version aktuell erschienen ist.

Neben ECHAM5 beinhaltet EMAC das Modular Earth System Modell (MESSy), welches als Online-Interface ECHAM5 mit verschiedenen Submodellen verbindet. Mit Hilfe dieser Submodelle (aktuell gibt es über fünfzig) wird das Modellsystem unter anderem mit einer umfangreichen Chemie der Atmosphäre ergänzt. Je nach wissenschaftlicher Anwendung können über MESSy die unterschiedlichen Submodelle ausgewählt und verwendet werden. EMAC wird am SCC vor allem auf den Rechen-systemen IC2, HC3 und dem AIX-System verwendet.

Die Anzahl der EMAC-Anwender hat sich in den letzten Jahren kontinuierlich gesteigert, was sich auch in der ständig wachsenden Teilnehmerzahl der jährlichen EMAC-Symposien widerspiegelt. Um das Modellsystem auf eine gemeinsame Basis zu stellen und um eine möglichst hohe Transparenz bezüglich der unterschiedlichen Modellentwicklungen und -anwendungen, die an den unterschiedlichen Instituten durchgeführt werden, zu gewährleisten, wurde am 1. August 2013 das MESSy-Konsortium gebildet. An diesem Konsortium sind zurzeit sieben Institutionen (DLR, FZJ, FUB, KIT, Universität Mainz sowie das Max-Planck-Institut für Chemie und das Cyprus Institute in Zypern) beteiligt. Von Seiten des KIT gehören sowohl das IMK als auch das SCC dem MESSy-Konsortium an. Innerhalb des gemeinsamen Konsortial-Projektes „Earth System Chemistry Integrated Modelling (ESCIMo)“ werden aktuell am DKRZ in Hamburg verschiedene Langzeitsimulationen mit wissenschaftlichem Fokus auf der vergangenen und zukünftigen Entwicklung der Ozonschicht durchgeführt. Die Ergebnisse dieser Simulationen sollen in den nächsten „Ozone Assessment Report der World Meteorological Organization (WMO)“ eingehen, welcher in ähnlicher Form wie im IPCC-Report die aktuellsten wissenschaftlichen Ergebnisse zur Entwicklung der Ozonschicht zusammenfasst.



Die internationalen Teilnehmerinnen und Teilnehmer des diesjährigen EMAC-Symposiums erörterten insbesondere die Weiterentwicklung und Verwendung des gleichnamigen Chemie-Klimamodells.
Foto: Thomas Reddman

Die insgesamt 31 wissenschaftlichen Vorträge des Symposiums umfassten unterschiedlichste Anwendungsbereiche von EMAC. Die Themen reichten dabei von neuen Modellentwicklungen wie die Integrierung des Ozeans in das EMAC-Modellsystem, die Entwicklung eines Submodells zur Berechnung des mittleren Alters der Luft oder die Kopplung von MESSy mit COSMO zur regionalen Modellierung bis hin zu konkreten wissenschaftlichen Anwendungen. So wurde beispielweise über wissenschaftliche Anwendungsfelder, wie die Bewertung des Luftverkehrs oder den Einfluss der Aerosole auf die Atmosphäre oder die Wechselwirkungen zwischen atmosphärischer Chemie und Klimaänderung diskutiert. Die Pausen und gemeinsamen Abendveranstaltungen boten darüber hinaus Gelegenheit, persönliche Erfahrungen und Informationen zum Modellsystem auszutauschen.

Dr. Ole Kirner, Roland Ruhnke

3rd annual EMAC symposium at SCC

In June 2013 the third annual EMAC symposium took place at SCC where international leading experts discussed the different application fields of the global chemistry climate model ECHAM5/MESSy Atmospheric Chemistry (EMAC). The model is used at KIT in the Institute of Meteorology and Climatology (IMK) and at SCC in the Simulation Lab Climate and Environment. EMAC plays an important international scientific role and is represented by the MESSy consortium.

Delegation der Universität Süd-Ural am SCC

Im Oktober 2013 war eine Delegation aus Russland von der Staatlichen Universität Süd-Ural (SUSU) auf Besuchstour durch die deutschen Hochschulrechenzentren. Die Delegation, die von Prof. Pavel Kostenetskiy, dem Leiter des Supercomputer Simulation Laboratory der SUSU angeführt wurde, stattete auch dem SCC einen Besuch ab.

Das Treffen ging auf eine Initiative von Prof. Gleb Radchenko zurück, dem Dekan der Mathematik- und Informatik-Fakultät der SUSU, der bereits seit der „International Supercomputing Conference 2012“ in Hamburg in engem Kontakt mit der Abteilung Scientific Computing und Simulation (SCS) des SCC steht.

Es fand ein Erfahrungsaustausch statt, der sich insbesondere auf Strukturen, Aktivitäten und Hochleistungsrechner der jeweiligen Institution bezog.

Prof. Kostenetskiy präsentierte unter anderem zahlreiche wissenschaftliche Beispiele und Kollaborationen der HPC-Nutzer an der SUSU mit der Automobil-, Stahl- und Öl-Industrie. Die Beteiligten konnten nicht nur Gemeinsamkeiten im Bereich der Organisation des Rechenzentrums und im Betrieb von Hochleistungsrechnern herausarbeiten, sondern auch Parallelen und gemeinsames Interesse an der Anwenderunterstützung sowie weitere Themen für eine potenzielle, wissenschaftliche Zusammenarbeit im künftigen EU-Rahmenprogramm identifizieren. Insbesondere stießen die Karlsruher Konzepte zu den Simulation Laboratories und Data Life Cycle Labs bei den Gästen auf großes Interesse und wurden als Möglichkeiten gesehen, Erfahrungen und Kompetenzen im Bereich der Community-orientierten Unterstützung

von HPC-Nutzern auszubauen, beispielsweise durch einen gemeinsamen Austausch von Studierenden und Gastwissenschaftlern. Den Abschluss des Besuchs, von dem sich die Delegation sehr beeindruckt zeigte, bildete eine Führung durch die Rechnerräume des SCC.

Dr. Holger Marten, Dr. Gevorg Poghosyan

Delegation of South Ural State University at SCC

In October 2013 a delegation of the South Ural State University (SUSU) from Russia was visiting Germany's scientific computing centres. The delegation led by Prof. Pavel Kostenetskiy, head of the Supercomputer Simulation Laboratory of SUSU, was also at SCC. The visit had been initiated by Prof. Gleb Radchenko, Dean of the Mathematics and Computer Science Faculty of SUSU, who has already been in contact with SCC's department Scientific Computing and Simulation since the International Supercomputing Conference 2012 in Hamburg.

During the meeting experience was shared on structures and activities as well as HPC systems of the respective institutions. Prof. Kostenetskiy informed among other things on numerous research examples and collaborations of HPC users at SUSU with the automotive, steel and oil industry. The presentations helped the participants to identify similarities in the administration of a computing centre and supercomputers in general as well as a common interest in the organisation of HPC support and potential scientific collaborations in the next EU framework program. In this regard especially the concept of the Karlsruhe simulation laboratories and data life cycle labs aroused big interest as a potential field of cooperation in the exchange of students and visiting scientists.

The visit of the delegation, being very impressed by SCC's activities, was completed by a guided tour of the computing rooms.



Höhepunkt des Besuchs der russischen Delegation war eine Führung durch die Rechnerräume des SCC (von links nach rechts): Dr. Gevorg Poghosyan (SCC), Prof. Pavel Kostenetskiy (SUSU), Dr. Holger Marten (SCC), Irina Sokolinskaya (SUSU), Prof. Dr. Achim Streit (SCC), Dr. Anna Osipova (SUSU) und Dr. Ivan Kondov (SCC).
Foto: SCC

552. WE-Heraeus-Seminar

„Physics of biomolecular Folding and Assembly: Theory meets Experiment“



Auf der molekularen Ebene funktioniert Leben mit Hilfe nanoskaliger Maschinen wie Proteinen, Ribonukleinsäure (RNS) oder Desoxyribonukleinsäure (DNS). Beeindruckende experimentelle Fortschritte haben in den letzten Jahren die Menge an Informationen über diese Moleküle explodieren lassen. Im 21. Jahrhundert besteht die große Herausforderung auf diesem Gebiet darin, das vorhandene Wissen zu systematisieren und es quantitativ zu verstehen und zu modellieren. Angesichts der Komplexität biologischer Systeme entstehen oftmals erst durch interdisziplinäre Zusammenarbeit aus Informatik, Physik und (Bio)Chemie solche Erkenntnisgewinne.

Das 552. WE-Heraeus-Seminar, das vom 2. bis 6. Februar 2014 stattfindet, bringt weltweit anerkannte experimentell und theoretisch arbeitende Spezialisten mit Studierenden und jungen Wissenschaftlern im Physikzentrum Bad Honnef für etwa eine Woche zusammen, um den direkten Austausch aus verschiedenen Perspektiven zu stimulieren. Zur Förderung dieser Idee sieht das Programm Zeit für umfangreiche Diskussionen wie auch Pausen für die Reflektion und den informellen Kontakt ausdrücklich vor. Das Seminar wird hauptverantwortlich von Dr. Alexander Schug und Dr. Abhinav Verma vom SCC organisiert und durch eine großzügige Unterstützung der Wilhelm und Else Heraeus-Stiftung ermöglicht. Die Stiftung genießt hohes Ansehen und gilt als eine der bedeutendsten privaten Förderinstitutionen auf dem Gebiet der Physik in Deutschland.

Dr. Alexander Schug

Weitere Informationen

<http://www.scc.kit.edu/en/research/8901.php>
<http://www.we-heraeus-stiftung.de/>

Tagungsort der renommierten Heraeus-Seminare ist in der Regel das Physikzentrum in Bad Honnef. Markenzeichen dieser Veranstaltungen ist eine ungezwungene Atmosphäre, die viel Gelegenheit für persönliche Kontakte bietet.
 Foto: Wilhelm und Else Heraeus-Stiftung

552nd WE-Heraeus-Seminar “Physics of Biomolecular Folding and Assembly: Theory meets Experiment”

On the molecular level life functions by concerted biomolecular machines like proteins, Ribonucleic acid (RNA) or Deoxyribonucleic acid (DNA). Both ingenious experimental advances and theoretical modeling have led to a significantly better understanding of the underlying principles. The 552nd WE Heraeus Seminar which will be hold at the Physikzentrum Bad Honnef from 2nd till 6th February 2014 gathers experts from around the world to present and discuss the progress in this interdisciplinary field. The Wilhelm and Else Heraeus Foundation is a renowned private institution which supports scientific research and education with emphasis on physics.

Further information

<http://www.scc.kit.edu/en/research/8901.php>
<http://www.we-heraeus-stiftung.de/>

SCC-Informationsstand bei der Erstsemesterbegrüßung Druckdienste, WLAN und Poolräume im Mittelpunkt der Fragen

Im Wintersemester 2013/2014 haben mehr als 4500 junge Leute ihr Studium am KIT aufgenommen. Das KIT hieß die Studienanfängerinnen und -anfänger Mitte Oktober bei der feierlichen „Erstsemesterbegrüßung“ in der Karlsruher Schwarzwaldhalle herzlich willkommen. Neben Ansprachen von Vertretern der KIT-Leitung, der Stadt Karlsruhe und der Studierendenvertretung standen Kabarett, musikalische Einlagen und ein Erstsemester-Quiz auf dem Programm. Viele Besucher informierten sich im Anschluss an das Festprogramm an den verschiedenen Ständen im Foyer. Das SCC war ebenfalls mit einem Informationsstand an der Veranstaltung beteiligt.

KIT-Präsident Prof. Dr. Holger Hanselka beglückwünschte die Erstsemester zu ihrer Wahl, am KIT zu studieren. Neben der in Deutschland einmaligen Nähe zur Großforschung bietet das KIT auch sehr gute Rahmenbedingungen, beispielsweise durch die umfangreichen Angebote der Bibliothek und das auf dem Campus kostenlos nutzbare WLAN. Prof. Hanselka betonte auch die Wichtigkeit von Netzwerken und persönlichen Kontakten und lud die Studienanfänger und ihre Begleitungen ein, die Informationsstände der KIT-Einrichtungen, Hochschulgruppen und Partner beim anschließenden Get-Together zu besuchen, da auch das Wissen um Ansprechpartner in den zentralen Einrichtungen von Bedeutung sei.

Viele Besucher nutzten die Gelegenheit, und so war auch der Stand des SCC außerordentlich gut besucht. Im Mittelpunkt der Fragen standen insbesondere Druckdienste und -kosten, WLAN sowie die Nutzungsmöglichkeiten der Computer in den Poolräumen. Die ausgelegten Flyer

informierten darüber hinaus über E-Mail, das Arbeiten von zuhause über VPN und erste Schritte am SCC. Auch Prof. Dr. Alexander Wanner, Vizepräsident für Lehre und akademische Angelegenheiten, besuchte die Informationsstände.

Das SCC stand bereits in der Orientierungsphase auf dem Programm der Einführungsveranstaltungen der Fachschaften. Die Führungen werden sehr gut angenommen und bieten einen ersten Einblick in die Angebote und Dienste des SCC. Insgesamt ergaben sich sehr konstruktive und anregende Gespräche und vielfach die Gelegenheit, auf Services des SCC hinzuweisen, die für ein erfolgreiches Studium hilfreich sind.

Karin Schäufele



Karin Schäufele und Christina Petri vom SCC (links im Vordergrund) informierten die Studienanfänger bei der Erstsemesterbegrüßung über die Services des SCC.
Foto: Bernd Rische

SCC booth for KIT freshmen Questions focused on print services, WLAN and computer pools

In the 2013/2014 winter semester, more than 4500 young people have taken up their studies at KIT. In the middle of October KIT welcomed the freshmen in the Karlsruhe Schwarzwaldhalle. SCC participated in the event with an information booth where the new students especially showed interest in SCC's print services, WLAN and computer pools.

Juniorvorlesung zur Privatsphäre in sozialen Medien

Facebook und andere soziale Medien sind im Leben vieler Kinder und Jugendlicher nicht mehr wegzudenken. Eine Studie unter Kindern im Alter von sechs bis 13 Jahren verortet Facebook auf Rang eins der beliebtesten Webseiten: „Die Konzentration auf Facebook als beliebtestes Angebot der Kinder ist durchaus kritisch zu bewerten. Nach den Nutzungsbedingungen des Unternehmens ist die Anmeldung prinzipiell erst ab 13 Jahren erlaubt. Zudem steht Facebook seit einiger Zeit hinsichtlich des Umgangs mit den persönlichen Daten der Nutzer stark in der Kritik.“ [1]

Die Arbeit der Forschungsgruppe Dezentrale Systeme und Netzdienste von Prof. Dr. Hannes Hartenstein brachte – insbesondere im Rahmen einer Dissertation [2] – eine Reihe von Erkenntnissen darüber hervor, welche über Facebook und andere soziale Medien geteilten Daten potenziell ungewollt für Dritte einsehbar und sogar Personen oder zumindest anderen Web-Profilen einer Person zuordenbar sind. Ferner wurde untersucht, wie gut Dritte selbst nicht angegebene Daten eines Nutzers durch geteilte Informationen von dessen Facebook-Freunden erschließen können. Die zugehörigen Forschungsarbeiten dienen der Quantifizierung von Risiken bezüglich der Privatsphäre bei der Nutzung sozialer Medien und der Einführung neuer technischer Konzepte, um Nutzer im Umgang mit sozialen Medien und bei der Steuerung von Datenflüssen zu unterstützen.

Die Erkenntnisse dieser Studien wurden von der oben genannten Forschungsgruppe nun in einen kindgerechten Vortrag überführt, der unter anderem im Rahmen des FoSS-SportsCamp 2013 gehalten wurde. Dabei handelt es sich um ein Sport- und Freizeitangebot des Instituts für Sport und Sportwissenschaft des KIT für Kinder im Alter von 12 bis 14 Jahren (weitere Informationen zur Juniorvorlesung finden sich unter [3]). Auch im Rahmen der Kinder-Uni Bretten wurde diese Vorlesung noch einmal angeboten, um dem jungen Publikum aktuelle Forschungsthemen näher zu bringen. Im Spannungsfeld Facebook und Privatsphäre erreicht dies die Nutzer sozialer Medien insbesondere in einem Alter, in dem die ersten Erfahrungen mit diesen IT-Diensten gemacht werden.

Dr. Sebastian Labitzke



Dr. Sebastian Labitzke, Mitarbeiter am SCC und in der Forschungsgruppe Dezentrale Systeme und Netzdienste, erklärte den Kindern des FoSS SportsCamp die Risiken bei der Nutzung sozialer Medien.
Foto: FoSS-Foto/SportsCamp 2013

Referenzen:

[1] KIM-Studie 2012, Kinder + Medien, Computer + Internet, Medienpädagogischer Forschungsverbund Südwest, <http://www.mpfs.de/index.php?id=548>

[2] Sebastian Labitzke, Avoiding Unintended Flows of Personally Identifiable Information – Enterprise Identity Management and Online Social Networks, KIT Scientific Publishing, Dissertation 2013

[3] Swantje Scharenberg, Facebook-Friends – Bewegung im Netz?, FoSS-Newsletter Nr. 27, August 2013

Children's lecture on privacy in online social networks

Facebook and other Online Social Networks (OSNs) are not only popular among adults, but also and in particular among children under 13 years, although Facebook only permits access to children from the age of 13 up. Hence, the research group Decentralized Systems and Network Services of Prof. Dr. Hannes Hartenstein transferred research findings gained by investigating OSNs into a lecture being understandable for children from 10 to 14 years. This lecture was given in the context of the FoSS-SportsCamp 2013 at KIT and will be repeated for other groups of children in the future.

SCC auf internationaler Supercomputing Conference ISC13

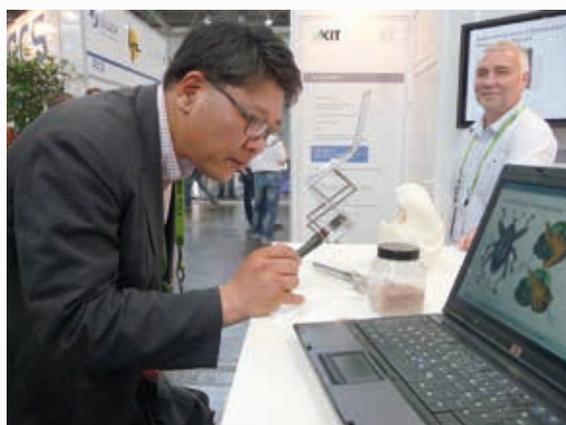
Das SCC war auch in diesem Jahr wieder mit einem eigenen Stand (Nr. 746) auf der International Supercomputing Conference ISC13 im Juni in Leipzig vertreten. Die europaweit größte Konferenz zu High Performance Computing (HPC), Network und Storage bietet den Teilnehmern aus Forschung, Industrie und Wirtschaft die Möglichkeit, neueste Entwicklungen, Ergebnisse und Produkte vorzustellen sowie Erfahrungen und Informationen auszutauschen. Auf der diesjährigen Konferenz waren 153 Aussteller aus 53 Ländern vertreten.

Das SCC präsentierte Forschungsarbeiten aus den Bereichen Daten-Management und -Analyse, sichere IT-Föderationen, Computational Science & Engineering und dynamische IT-Infrastrukturen. Schwerpunktthemen waren die am SCC angesiedelten Simulation Laboratories (SimLabs) und das Management großskaliger Daten. Als ein Beispiel für Datenanalyse aus dem Bereich der Lebenswissenschaften wurde das Beingelenk-Modell eines papuanischen Rüsselkäfers präsentiert, das im Gegensatz zu herkömmlichen biologischen Bewegungsapparaten nicht aus einem Scharniergelenk, sondern aus einem Schraubengelenk besteht. Erzeugt wurde das Modell mit Hilfe von Synchrotronstrahlung, einer visuellen Analyse der generierten Daten und eines 3D-Druckers. Ebenso stand das Grid Computing Centre Karlsruhe (GridKa) im Fokus, das als deutsches Tier1-Zentrum für den Large Hadron Collider am CERN in Genf maßgeblich an der Entdeckung des Higgs-Boson-Teilchens beteiligt war.

(red)



Mitarbeiter des SCC informierten Besucher über aktuelle Forschungsarbeiten aus dem HPC-Umfeld.
Foto: SCC



Das Beingelenk-Modell des papuanischen Rüsselkäfers, das im Gegensatz zu herkömmlichen biologischen Bewegungsapparaten nicht aus einem Scharniergelenk, sondern aus einem Schraubengelenk besteht, erregte immer wieder das Interesse der Besucher am SCC-Stand.
Foto: SCC

SCC at the international Supercomputing Conference ISC13

At the international Supercomputing Conference ISC13 in Leipzig in June SCC presented itself again with its own booth. The annual conference has become Europe's largest HPC event and in 2013 had participants from 53 nations. SCC demonstrated current research activities in the fields of data management und -analysis, secure IT-federations, computational science & engineering, and dynamic IT-infrastructures.



Gold für den Software-Cluster: Europäische Auszeichnung für exzellentes Cluster Management

Der Software-Cluster wurde für exzellentes Cluster Management ausgezeichnet. Nach einem umfangreichen Audit hat die European Cluster Excellence Initiative (ECEI) dem Software-Cluster im Juni 2013 das so genannte „GOLD Label for Cluster Management Excellence“ verliehen. Europaweit haben bislang nur 16 Clusterorganisationen diese Auszeichnung erhalten.

In ganz Europa gibt es heute bereits etwa 1.500 Clusterorganisationen für die verschiedensten Branchen und Regionen. Das „GOLD Label for Cluster Management Excellence“ ist ein unabhängiges Qualitätssiegel, das an europäische Cluster-Organisationen vergeben wird, deren Cluster Management nachweislich hochprofessionell ist und die sich zudem verpflichten, auch weiterhin ihre Strukturen und Abläufe zu optimieren. Insgesamt sind bislang nur 16 Clusterorganisationen in ganz Europa mit dem „GOLD Label“ ausgezeichnet, darunter zwei deutsche Spitzencluster: der Software-Cluster und MicroTEC Südwest.

„Professionalisierung und Exzellenz im Clustermanagement werden zunehmend wichtige Themen für Cluster-Organisationen. Diese Auszeichnung ist für mich ein Beleg dafür, dass wir hier beim Software-Cluster auf dem richtigen Weg sind“, so Gino Brunetti, Manager des Software-Clusters.

Das GOLD Label wurde von der ECEI im Auftrag der Europäischen Kommission entwickelt, um das Management der europäischen Cluster-Organisationen vergleichbar zu machen. Der Verleihung des Labels ging ein ausdifferenziertes, mehrstufiges Audit des Cluster Managements in Bezug auf seine Strategie, Strukturen, Dienstleistungen durch das European Secretariat for Cluster Analysis (ESCA) voraus.

Insgesamt wird das Clustermanagement anhand von 31 Kriterien bewertet, wofür maximal 150 Punkte vergeben werden. Mit 128 verliehenen Punkten liegt der Software-Cluster unter den fünf bestbewerteten Cluster-Organisationen. Die Schwelle, die für das Erreichen des GOLD Labels notwendig ist, liegt bei 120 Punkten.

(red)

Weitere Informationen

<http://www.softwarecluster.com>

<http://www.cluster-analysis.org/gold-labelof-the-european-cluster-excellence-initiative-ecei>



Software-Cluster

Gold for the Software-Cluster: European Award for Excellence in Cluster Management

The German Software-Cluster has been recognised for excellence in cluster management. After an extensive audit, the European Cluster Excellence Initiative (ECEI) has awarded the software cluster in June 2013 the "GOLD Label for Cluster Management Excellence". Only 16 European cluster organisations have received this award so far.

Further information

<http://www.softwarecluster.com>

<http://www.cluster-analysis.org/gold-labelof-the-european-cluster-excellence-initiative-ecei>

Neues Zertifikat „Softwareinnovationen für das Digitale Unternehmen“ im Masterstudium Informatik

In enger Kooperation mit Universitäten und Unternehmen hat der Software-Cluster die Zusatzqualifikation „Softwareinnovationen für das Digitale Unternehmen“ entwickelt. Studierende an den Universitäten in Darmstadt, Kaiserslautern, Karlsruhe und Saarbrücken weisen mit dem gleichnamigen Zertifikat ab dem Wintersemester 2013/14 vertiefte Kenntnisse in für die Wirtschaft wichtigen Softwaretechnologien nach und qualifizieren sich dadurch besonders für die vielen Softwareunternehmen in der Cluster-Region.

Das Zertifikat kann an den vier Cluster-Universitäten TU Darmstadt, TU Kaiserslautern, Karlsruher Institut für Technologie (KIT) und Universität des Saarlandes während des Informatik-Masterstudiums erworben werden. Mehr als 200 Veranstaltungen stehen in einem gemeinsamen Referenzcurriculum der vier Universitäten zur Auswahl und können miteinander kombiniert werden. Die Veranstaltungen sind vier Themenkreisen zugeordnet, die alle für die Unternehmenssoftware der Zukunft von großer Bedeutung sind: Cloud Computing, Pervasive Computing, IT Security und Software Engineering. Um die Beratung und Betreuung der Studierenden kümmert sich ein Koordinator an jeder Universität.

„Das Zertifikat ‚Softwareinnovationen für das Digitale Unternehmen‘ ist für alle Informatik-Studierenden relevant, die sich schon während des Master-Studiums auf eine Tätigkeit im besonders dynamischen Umfeld der Unternehmenssoftware vorbereiten wollen. „Im Software-Cluster gibt es Unternehmen von jeder Größe, die dringend Absolventen mit diesen Fähigkeiten brauchen“, sagen die Koordinatoren des Programms, Prof. Dr. Stefan Katzenbeisser (TU Darmstadt), Prof. Dr. Dieter Rombach (TU Kaiserslautern), Prof. Dr. Stefan Tai (Karlsruher Institut für Technologie) und Prof. Dr. Antonio Krüger (Universität des Saarlandes).

Den Anstoß zur Entwicklung der Zusatzqualifikation lieferte eine Umfrage zum Fachkräftebedarf der Softwareunternehmen in der Cluster-Region. Das Ergebnis erbrachte eine besonders große Nachfrage nach hoch qualifizierten Softwareexperten mit Spezialkenntnissen zu Cloud Computing, Pervasive Computing, IT Security und Software Engineering. Durch das Zertifikat schuf der der Software-Cluster die Möglichkeit, diese Kompetenzen bereits während des regulären Studiums zu vertiefen.

(red)



Software-Cluster

Weitere Informationen

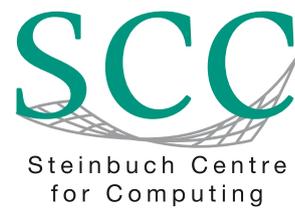
<http://master.software-cluster.org>

New certificate “software innovations for the digital enterprise” for the computer science master programme

In close cooperation with universities and enterprises the Software-Cluster has developed the additional qualification “software innovations for the digital enterprise” for the computer science master programme. With this certificate students at the universities in Darmstadt, Kaiserslautern, Karlsruhe and Saarbrücken are able to demonstrate in-depth knowledge of special software technologies being important to enterprises particularly in the cluster region.

Further information

<http://master.software-cluster.org>



Karlsruhe Institute of Technology (KIT)
Steinbuch Centre for Computing (SCC)
76131 Karlsruhe
Tel: 0721/608-43754 oder -25601
E-Mail: contact@scc.kit.edu