

AUSGABE 2 | 2024

# SCC-NEWS

NEWSLETTER DES SCIENTIFIC COMPUTING CENTER

Umzug vom Campus Süd  
in ein externes Rechen-  
zentrum

*Moving from  
Campus South to a  
Colocation Facility*

Überblick über  
die PUNCH4NFDI-  
Recheninfrastruktur

*Overview of the  
PUNCH4NFDI compute  
infrastructure*

*bwJupyter für  
die Lehre – Start der  
erweiterten Pilotphase*

*bwJupyter for Higher  
Education enters  
Extended Test Phase*



## Liebe Leserinnen und Leser,

ein wissenschaftliches Rechenzentrum wie das SCC ist in allen Missionen des KIT tätig; in Forschung, Lehre, Transfer sowie im Betrieb und Support von grundlegenden IT-Diensten – intern, für „The Länd“, Deutschland und darüber hinaus. Jede unserer Zielgruppen hat einen anderen Umgang mit Informationstechnologie sowie Forschung und Entwicklung. Spannender noch: jede Zielgruppe spricht eine andere



„Sprache“ und hat andere Bedürfnisse und Erwartungen an uns – seien es Studierende, Lehrende, Mitarbeitende in der Administration oder Forschende aller Disziplinen. In einem dynamischen und innovativen Arbeitsumfeld wie dem KIT benötigen alle die Infrastrukturen, Dienste und Anwendungen des SCC und seiner Partner. Die Kernkompetenz

für eine erfolgreiche Zusammenarbeit mit diesen diversen Zielgruppen ist daher die Übersetzung ihrer Anforderungen in eine für alle Beteiligten verständliche Sprache. Keines der in dieser Ausgabe vorgestellten Projekte gleicht dem anderen.

Wir geben auf Seite 28 einen Überblick, wie eine föderierte IT-Infrastruktur hochkomplexe Anforderungen an das Datenmanagement und die Datenprozessierung von Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftlern aus der nationalen und internationalen Kern-, Astro- und Astroteilchenphysik umsetzt.

Eine ganz andere Klientel ist in die Pilotphase des Dienstes „bwJupyter für die Lehre“ eingebunden. Hier geht es darum, dass Lehrende und Studierende möglichst effizient und intuitiv an Tools für die mathematische Simulation und die dazu passende Rechenleistung herangeführt werden (S. 37).

Selbst ein vermeintlich profaner Umzug von IT-Infrastruktur in ein externes Rechenzentrum beschäftigt eine Menge unterschiedlichster Menschen, beim Dienstleister, innerhalb des SCC aber auch KIT-weit. Lesen Sie über dieses umfangreiche Projekt auf Seite 5.

Viel Freude beim Lesen

Martin Frank, Martin Nußbaumer, Achim Streit

Dear readers,

A scientific computing center such as SCC is involved in all the missions of KIT: research, teaching, knowledge transfer, as well as the operation and support of fundamental IT services – internally, for "The Länd," in Germany, and beyond. Each of our target groups engages with information technology and research and development in a distinct manner. Even more intriguing: each target group "speaks"



a different language and has unique needs and expectations – whether they are students, educators, administrative staff, or researchers across various disciplines. In a dynamic and innovative working environment like KIT, all infrastructures, services, and applications provided by SCC and its partners are essential.

The core competency for successful collaboration with these diverse groups, therefore, lies in translating their requirements into a language that is comprehensible to all stakeholders. None of the projects presented in this edition is alike.

On page 28, we provide an overview of how a federated IT infrastructure meets the highly complex requirements for data management and processing from national and international researchers in nuclear, astrophysics, and astroparticle physics.

A completely different clientele is involved in the pilot phase of the service "bwJupyter for Teaching". This initiative aims to enable educators and students to efficiently and intuitively access tools for mathematical simulation alongside the appropriate computational resources (p. 37).

Even a seemingly mundane task, such as relocating IT infrastructure to an external data centre, engages a wide range of people – from service providers and SCC staff to participants KIT-wide. Read more about this extensive project on page 5.

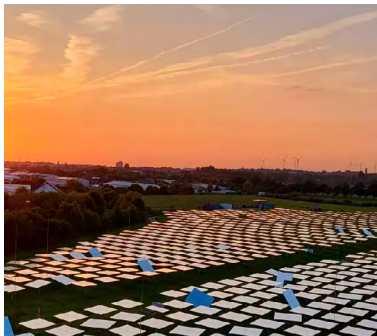
Enjoy reading this edition!

Martin Frank, Martin Nußbaumer, Achim Streit



## DIENSTE UND INNOVATION

- 05 Umzug vom Campus Süd in ein externes Rechenzentrum
- 09 Simulierte Angriffe erhöhen die IT-Sicherheit
- 13 Einführung von HISinOne am KIT



## FORSCHUNG UND PROJEKTE

- 19 textS and textM: Languages for modeling and simulation
- 24 AI-driven heliostat optimization for solar thermal power plants
- 28 Überblick über die PUNCH4NFDI-Recheninfrastruktur



## STUDIUM UND WISSENSTRANSFER

- 34 Forschungsdatenmanagement in der Praxis
- 37 „bwJupyter für die Lehre“ startet in die erweiterte Pilotphase
- 41 MathSEE Modeling Week – Forschung im Curriculum



## VERSCHIEDENES

- 45 Nadja Klein leitet neue Forschungsgruppe

# Umzug vom Campus Süd in ein externes Rechenzentrum

Aufgrund von anstehenden Sanierungsarbeiten im Rechenzentrum am Campus Süd wurde 2022 die Idee geboren, die dort laufende Hardware der Virtualisierungs-umgebung und die des Fileservice in ein externes Rechenzentrum umzuziehen. Dieses sollte einerseits die für die Redundanz erforderliche Entfernung von den KIT-Standorten haben, andererseits aber ausreichend nahe liegen für die Anbindung mit Glasfaser an beide Standorte sowie für kurze Anfahrtswege. Somit fiel der Blick bald auf das IPC4, ein Rechenzentrum der Firma TelemaxX, das sich ziemlich genau in der Mitte der beiden Standorte im Karlsruher Osten befindet (Abbildung 1).

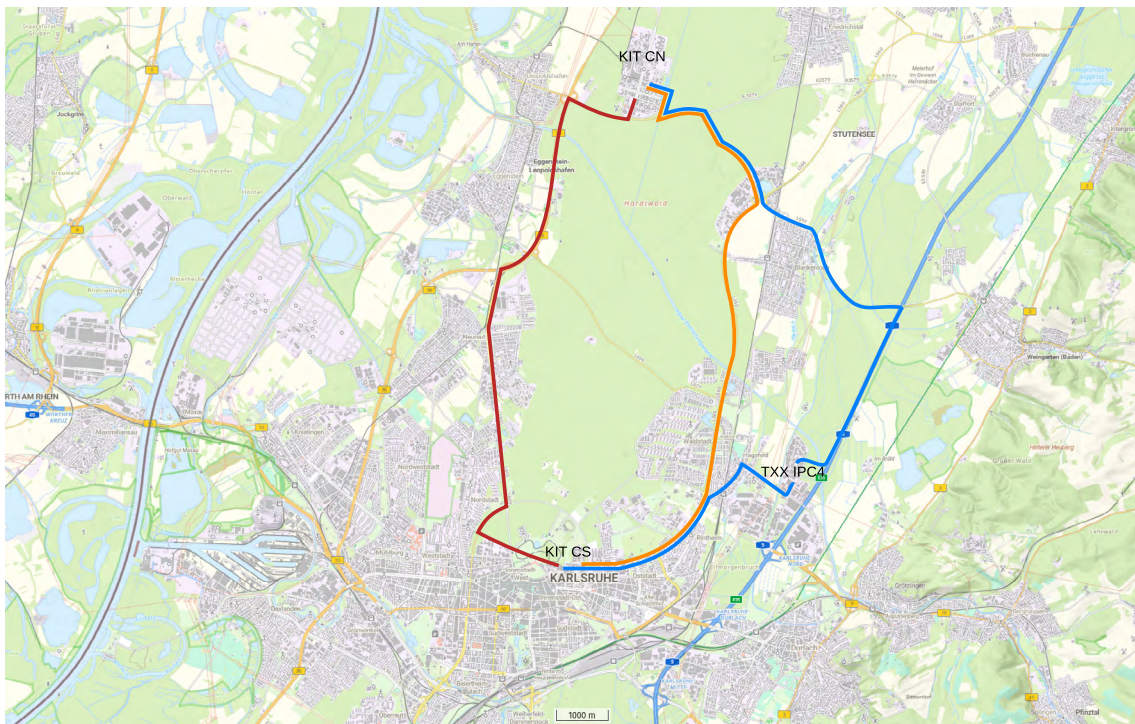


Abbildung 1: Neue Glasfaserstrecke zum IPC4 (blau) und bestehende Glasfaserstrecken zwischen Campus Nord und Campus Süd (rot, orange)

Ende Juli 2022 wurde initial mit TelemaxX Kontakt aufgenommen und im Oktober 2022 fanden die ersten Gespräche und ein Besuch im IPC4 statt, bei dem die involvierten SCC-Mitarbeitenden eine Führung durch das Rechenzentrum erhielten. Involviert waren von Anfang an auch Kollegen des Netze- und des Server-Hardware-Teams. So konnten alle Fragestellungen früh identifiziert und mit TelemaxX diskutiert werden. Weitere Gespräche und die Klärung vieler Detailfragen zogen sich bis in das Jahr 2023. Dazu gehörten die Themen Zertifizierungen, Details der Energiezufuhr, einen „Remote Hands“-Service, Zugänge, Erweiterungsmöglichkeiten und Versicherungen. Aufgrund der Begrenzung der maximalen Leistungsaufnahme pro Rack (Serverschrank) müssen mehr Racks gemietet werden, als von den Höheneinheiten notwendig wären. Auch musste die Einbautiefe der Hardware für den Fileservice bei der Größe der Racks berücksichtigt werden. Im späten Frühjahr traf das SCC die Entscheidung, die Möglichkeit des Umzugs in ein externes Rechenzentrum zu nutzen. Hierauf fanden weitere Gespräche im KIT statt und es folgte die positive Entscheidung aus der Leitungsebene für diese Maßnahme.

## Vorbereitungsphase

Im Oktober 2023 startete die Vorbereitungsphase für den Umzug. Das Netze-Team evaluierte DWDM-Systeme (Dense Wavelength Division Multiplexing) für den Betrieb der angemieteten Glasfaserstrecken zwischen IPC4 und Campus Nord sowie IPC4 und Campus Süd (Abbildung 1). Durch diese Strecken können die Systeme der Virtualisierungsumgebung (Server und Storage) und des Fileservice (File Storage und Object Storage) direkt ins KITnet angebunden werden. Auch das Netzdesign für die Integration des neuen IPC4-Standorts in das KITnet musste erarbeitet und die Verfügbarkeit der hierfür erforderlichen Netzkomponenten sichergestellt werden. Zeitlich war der Umzug gebunden an die Erneuerung des Storage für die Virtualisierungsumgebung, dessen Wartung Mitte 2024 auslief. Der Umzug sollte möglichst so stattfinden, dass die Migration direkt nach dem Aufbau des neuen Speichers beginnt und mit dem Wartungsende des alten Speichers abgeschlossen ist. Hierfür wurden schon Ende 2023 einige Server beschafft, die im IPC4 eingebaut werden sollten, so dass danach die Server aus dem Rechenzentrum am Campus Süd sukzessive ohne

Ausfall migriert werden konnten. Für den Fileservice ist der Standort Campus Süd der Backup-Standort, daher konnte hier ebenfalls ohne Ausfall oder vorherige umfangreiche Umstellungen migriert werden.

## **Beschaffungen und Terminkoordination**

Anfang 2024 wurden die Beschaffungen für das Housing bei TelemaxX (Miete von 8 Racks mit Strom- und Glasfaserzuführung), sowie die Glasfaserverbindungen von beiden Campus zum IPC4 und die DWDM-Systeme in die Wege geleitet. Nach Abschluss der hierfür erforderlichen Prozesse konnten die einzelnen Positionen im Februar bestellt werden. Die Lieferung der Racks an TelemaxX verzögerte sich etwas, wodurch der mit dem DWDM-Hersteller bereits vereinbarte Termin für die Installation und Schulung der Mitarbeitenden gefährdet war. Trotz noch nicht fertiggestellter Stromversorgung und Kühlung konnte jedoch durch eine temporäre Stromversorgung die Installation am vereinbarten Termin durchgeführt werden. Darüber hinaus ist für den unbegleiteten Zugang ins IPC4 eine vorherige Einweisung durch TelemaxX notwendig. Da diese am Tag vor der DWDM-Installation stattfand, war die Installation ohne das Beisein von TelemaxX möglich.

## **Installation der Hardware im IPC4**

Anschließend konnte mit dem Aufbau der Netzkomponenten im IPC4 begonnen werden. Es mussten 8 Leaf-Switches, 4 Spine-Switches und Switches für das Management sowie Konsolenserver verbaut werden. Allerdings war zu diesem Zeitpunkt durch eine Verzögerung bei einer durch TelemaxX beauftragten Firma die Kühlung für die Racks immer noch nicht installiert, so dass die Netzkomponenten nur für den initialen Test eingeschaltet werden konnten und dann wieder ausgeschaltet werden mussten. Aus diesem Grund verzögerte sich auch der Einbau des Speichers für die Virtualisierungsumgebung. Hierfür wurden jedoch durch die gute Kooperation von allen Beteiligten Lösungen gefunden. Mitte Juli – etwa 1,5 Monate hinter dem ursprünglichen Zeitplan – waren die Racks dann vollständig betriebsbereit und der Einbau des Speichers und die Migration der Virtualisierungsumgebung konnte beginnen. Die komplette Migration, auch des Fileservices, wurde – mit Unterbrechung in der Urlaubszeit – im Oktober abgeschlossen.

Nach zwei Jahren sehr guter Zusammenarbeit freuen sich nun alle Beteiligten über die erfolgreiche Umsetzung des Umzugs ins IPC4 (Abbildung 2). |

Klara Mall, Benedikt Neuffer, Thorsten Tüllmann



Abbildung 2: Die Hardware vom Campus Süd läuft jetzt im IPC4

### **MOVING FROM CAMPUS SOUTH TO A COLOCATION FACILITY**

Plans for large-scale renovations within Campus South' data center were the reason to relocate the hardware for parts of the virtual and file service infrastructure to an external colocation provider. Initial planning started in 2022, when TelexX' IPC4 facility was chosen as an ideal candidate given its unique location roughly in the middle between Campus North and Campus South. By October 2023 the migration plan was complete and all approvals up to the Executive Board were obtained. Over the following months, the hardware necessary to facilitate the migration was purchased and the data center was prepared for a migration beginning in May 2024. Due to some work delays on the provider's side the migration could only begin in mid-July and was completed by end of October. Two years of planning allowed for a mostly flawless migration without service interruptions.



# Simulierte Angriffe erhöhen die IT-Sicherheit

Das KIT-CERT ist als Sicherheitsteam am SCC angesiedelt und für die operative IT-Sicherheit am KIT zuständig. Am SCC arbeiten allerdings viele Betriebsteams in unterschiedlichsten Themenbereichen, was gerade bei diesem übergreifenden Thema eine Herausforderung für Organisation und Umsetzung sein kann. Wie kann eine möglichst ganzheitliche Betrachtung der IT-Sicherheit über Teams hinweg ermöglicht werden? Und wie kann sichergestellt werden, dass getroffene Maßnahmen auch wirklich effektiv sind?

```

L$ nxc smb sccfs.scc.kit.edu -u u -p "$(gopass show -o CERT/ /KIT-Account)" -d KIT --shares
SMB 141.52.28.141 445 SCC-ISI-01 [*] x32 (name:SCC-ISI-01) (domain:KIT.EDU) (signing:True)
SMB 141.52.28.141 445 SCC-ISI-01 [-] Error checking if user is admin on 141.52.28.141: unpack
SMB 141.52.28.141 445 SCC-ISI-01 [+] KIT\u :
SMB 141.52.28.141 445 SCC-ISI-01 [*] Enumerated shares
SMB 141.52.28.141 445 SCC-ISI-01 Share Permissions Remark
SMB 141.52.28.141 445 SCC-ISI-01 -----
SMB 141.52.28.141 445 SCC-ISI-01 Protected Schriebgeschützte Kopien vo
SMB 141.52.28.141 445 SCC-ISI-01 Stud READ Studierende Homeverzeichnis
SMB 141.52.28.141 445 SCC-ISI-01 Service-WORM READ Shares für geschützte Archi
SMB 141.52.28.141 445 SCC-ISI-01 bwLehrpool READ
SMB 141.52.28.141 445 SCC-ISI-01 OE-MC READ Mission Critical Services
SMB 141.52.28.141 445 SCC-ISI-01 Transfer
SMB 141.52.28.141 445 SCC-ISI-01 OE-CA READ Filespace für die OEs mit C
SMB 141.52.28.141 445 SCC-ISI-01 Stud-Home READ,WRITE Studierende Homeverzeichnis
SMB 141.52.28.141 445 SCC-ISI-01 Service READ Shares für zentrale Dienste
SMB 141.52.28.141 445 SCC-ISI-01 SCC-FTP READ FTP-Service des SCC
SMB 141.52.28.141 445 SCC-ISI-01 OE READ Filespace für die OEs

```

Ausgabe von „NetExec“, ein von den Penetrationstestern verwendetes Werkzeug

Für das SCC als zentralen IT-Serviceprovider am KIT ist IT-Sicherheit schon seit jeher ein sehr wichtiges Thema. Mit dem am SCC angesiedelten KIT-CERT, dem Computernotfallteam des KIT, gibt es am SCC eine große Expertise in der Bearbeitung von IT-Sicherheitsvorfällen. Darüber hinaus beschäftigt sich das KIT-CERT umfassend mit dem Thema IT-Sicherheit im Allgemeinen. Da ein vermiedener Vorfall immer besser ist als ein behandelter, betrifft das insbesondere die Prävention von Vorfällen.

## Der Security-Inkubator

Aufgrund der wachsenden Herausforderungen in der IT-Sicherheit in den letzten Jahren wurde im Jahr 2023 die Idee geboren, mit dem KIT-CERT und weiteren Personen aus verschiedenen Themenfeldern des IT-Betriebs am SCC einen Security-Inkubator ins Leben zu rufen, der sich dauerhaft mit für das KIT relevanten Themen der IT-Sicherheit und insbesondere der Sicherheit der zentralen IT-Dienste befasst. Da die Themenfelder Netze und Identity Management typische Einfallstore für Cyberangriffe darstellen, sind diese neben dem KIT-CERT fest im Security-Inkubator vertreten. Das Kernteam wurde jüngst durch einen Kollegen aus dem High Performance Computing ergänzt, da dort IT-Sicherheit schon seit längerer Zeit besonders im Fokus steht und bereits einiges an Expertise aufgebaut wurde.

Bei Bedarf wird weiteres Fachpersonal passend zum aktuell besprochenen Thema hinzugezogen. Der Security-Inkubator trifft sich alle zwei Monate, um über akute Themen und länger-fristige Projekte zu diskutieren und so die IT-Sicherheit der zentralen IT-Dienste kontinuierlich zu verbessern. Das erste vom Security-Inkubator erfolgreich abgeschlossene Projekt war die Beauftragung und Auswertung eines Penetrationstests auf das Active Directory des KIT.

## Active Directory, Penetrationstest, was ist das?

Active Directory (AD) ist eine unverzichtbare Komponente im Microsoft-Ökosystem, die einen Verzeichnisdienst und Authentisierung zur Verfügung stellt. Auch andere Dienste benötigen das AD für einen problemlosen Betrieb, welches daher einen wichtigen Vertrauensanker einer Organisation darstellt. Wird das AD von Angreifenden übernommen, ist dadurch effektiv die gesamte Organisation kompromittiert

und betriebsunfähig. Genau das ist bei den meisten der erfolgreichen Cyberangriffe auf Bildungs- und Forschungseinrichtungen in den letzten Jahren passiert.

Selbstverständlich wird die Komponente durch Fachpersonal betreut und konfiguriert, allerdings ist das System hochkomplex und hat eine lange Historie. Dadurch sind zum Beispiel Fehlkonfigurationen, nie ganz auszuschließen. Um eine unvoreingenommene Betrachtung zu erhalten, ist es daher üblich, spezialisierte Firmen mit einem Penetrationstest zu beauftragen. Dabei schlüpft die Firma in die Rolle des Angreifenden, um möglichst viele Sicherheitsprobleme aufzuspüren. Da das zentrale Active Directory normalerweise nicht direkt angreifbar ist, wird versucht, sich mehrstufig Zugriff zu verschaffen. Daher ist es nötig, auf gefundenen Sicherheitsproblemen aufzubauen und diese aktiv auszunutzen, um weitere Sicherheitsprobleme ausfindig zu machen. Abschließend wird ein Bericht mit allen "Findings", also den gefundenen Sicherheitsproblemen, übergeben.

## Durchführung und Ergebnisauswertung

Der Penetrationstest fand zwischen dem 22. Juli und dem 9. August 2024 im laufenden Betrieb statt – unbemerkt von den meisten Angehörigen des KIT. Für Penetrationstests steht im Land Baden-Württemberg ein Rahmenvertrag zur Verfügung. Der beauftragten Firma wurden lediglich ein Studierendenzugang und ein System im KIT-Netz als Startpunkt zur Verfügung gestellt. Findings betrafen vor allem zu offen konfigurierte Netzwerkverzeichnisse, auf denen Zugangsdaten und andere vertrauliche Dokumente gefunden werden konnten, sowie falsch konfigurierte Konten. Letztere konnten dadurch übernommen und als Ausgangspunkt für weitere Angriffe missbraucht werden. Die Übernahme des Active Directories selbst gelang allerdings nicht.

Mit dem fertigen Bericht konnte das KIT-CERT alle Betroffenen informieren, so dass diese in die Lage versetzt wurden, die auf ihrer Seite bestehenden Konfigurationsprobleme zu beheben. Insgesamt blickt der Security-Inkubator auf einen erfolgreichen Penetrationstest mit vielen wichtigen Erkenntnissen zurück.

## Zukunftspläne

Da einerseits das Active Directory nicht die einzige sicherheitsrelevante Komponente ist und andererseits neue Fehlkonfigurationen entstehen können, plant der Security-Inkubator bereits weitere Penetrationstests, um die IT-Sicherheit am KIT kontinuierlich weiter zu verbessern. |

Klara Mall, Peter Oettig

### **IMPROVING IT SECURITY BY PAYING SOMEONE TO ATTACK YOU**

In order to further improve IT security at SCC and KIT through a holistic approach, a new working group was formed in 2023, appropriately named "Security Incubator". The group consists of the KIT-CERT, a team responsible for operational IT security at KIT, and multiple colleagues from different operational teams at SCC. The first sizeable project was commissioning a penetration test of one of the central authentication systems, the Active Directory. The company contracted with this penetration test was able to identify multiple issues at the level of organizational units, but was not able to compromise the targeted system. The "Security Incubator" made sure that these problems were alleviated and is already planning for further penetration tests.

# Einführung von HISinOne am KIT

Das SCC hat in enger Zusammenarbeit mit der HIS eG von August 2022 bis Oktober 2024 die neue Campusmanagement-Software HISinOne am KIT eingeführt. HISinOne ist eine integrierte, webbasierte Campus Management Software für Hochschulen. Alle Studierendendaten werden zentral erfasst und gespeichert, damit sie verschiedenen Stellen als Datengrundlage zur Verfügung stehen. Eine besondere Herausforderung war das Zusammenspiel von HISinOne mit CAS Campus, da beide Softwareprodukte unterschiedliche Aspekte am KIT bedienen. Daher musste eine entsprechende Integration zwischen HISinOne und CAS Campus am SCC entwickelt werden. Ein umfangreiches Berichtswesen wurde ebenfalls umgesetzt.

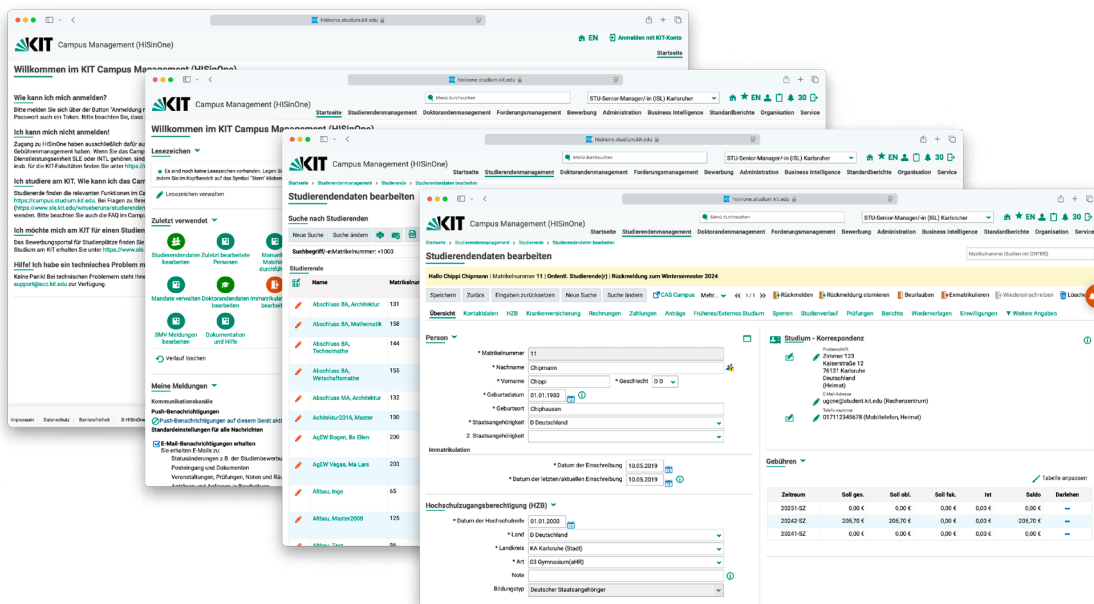


Abbildung 1: HISinOne-Weboberfläche im KIT-Layout.

Vor der Einführung von CAS Campus am KIT wurde, damals noch an der Universität Karlsruhe, das komplette Campus Management mit der auf Windows-Clients basierten Software der Firma HIS (Hochschul-Informationen-Systeme eG) betrieben. Mit der schrittweisen Einführung von CAS Campus ab 2011 wurden die alten HIS-Module für die Prüfungsverwaltung (POS) und die Studienbewerbung (ZUL) abgelöst, jedoch war das für das Studierendenmanagement (SOS) relevante Modul bis vor Kurzem weiterhin am KIT im Einsatz. Diese Module wurden zum Ende des Jahres 2030 abgekündigt. HISinOne ist die neue, komplett webbasierte Softwaregeneration der HIS eG. Nach einer internen Evaluation mit den am KIT für die Verwaltung von Studierendendaten zuständigen Fachabteilungen (Studierendenservices, International Students Office) und einer umfangreichen Analyse in Zusammenarbeit mit der HIS eG wurde gemeinsam entschieden, SOS durch das STU-Modul aus HISinOne zu ersetzen. HISinOne-STU ist für das Studierenden- und Gebührenmanagement an Hochschulen entwickelt und bietet umfangreiche Funktionen für die Verwaltung und Organisation von Studierendendaten.

## **Einführungsprojekt mit HIS**

Im August 2022 startete das SCC das Einführungsprojekt für HISinOne-STU. Im ersten Schritt stellte HIS das Produkt detailliert vor. In den folgenden Prozessworkshops wurden alle relevanten Abläufe aus dem Bereich Studium und Lehre analysiert und mit den Funktionen der Software abgeglichen. Ziel war es sicherzustellen, dass insbesondere die Anforderungen der Fachabteilungen bestmöglich in die Lösung integriert werden.

Ende 2022 erfolgte die fachliche Planung, begleitet von ersten Einweisungen für die Administrierenden. Parallel dazu wurden Technik-Workshops durchgeführt, um die notwendige Infrastruktur aufzubauen. Damit wurde das technische Fundament für die umfangreiche Konfiguration der Entwicklungsumgebung (DEV-Umgebung) in Q1 2023 gelegt. Dieser Schritt war entscheidend für die Anpassung von HISinOne an die KIT-spezifischen Anforderungen (Abbildung 1). Gleichzeitig startete die erste Datenmigration und ermöglichte die Anbindung an die bestehende CAS-Campus-Infrastruktur.

Nachdem in Konfigurationsworkshops die grundlegenden Einstellungen im System vorgenommen worden sind, konnten die Key-User aus dem Studierendenservice und dem International Student Office (IStO) in einer viertägigen Schulung in Q3 2023 durch zwei Fachberater der HIS erste Schritte im System unternehmen und eingehend testen.

Anschließend wurde das Go-Live im ersten Halbjahr 2024 vorbereitet. Als die Rückmeldungen systemseitig umgesetzt waren, wurden alle zukünftigen Anwendenden durch zwei intensive, je dreitägige Schulungen für den Studierendenservice und das IStO durch die HIS-Fachberater in den SCC-Poolräumen in den Umgang mit HISinOne-STU eingewiesen.

Im Juni 2024 wurde schließlich die Studierendenverwaltung am KIT im Rahmen einer umfangreichen, einwöchigen Migration auf HISinOne-STU umgestellt.

## **Bereinigung und Migration der Daten aus den HIS-Altssystemen**

Die Grundlage für einen reibungsarmen Übergang zu HISinOne-STU bildete die Migration der Daten aus dem Altsystem. Da STU bezüglich Datenkonsistenz wesentlich restriktiver agiert als die Vorgängersoftware SOS, waren im Vorfeld äußerst umfangreiche Datenbereinigungen notwendig. Angefangen von der Korrektur von Rollen bis hin zur Bereinigung der Meldungen der Krankenkassen.

Diese Änderungen mussten auch nach CAS Campus übermittelt werden, da Daten aus älteren Studiengangsabbildungen bisher noch nicht dort vorhanden waren. Durch die Ablösung von SOS zu STU ist die Erstellung der Studienbescheinigungen auch für bereits ausgeschiedene Studierende nach CAS Campus übergegangen. Daher sind diese Daten in CAS Campus erforderlich und mussten angelegt werden.

Im Anschluss waren in STU diverse Nacharbeiten notwendig, z.B. bei den Gültigkeitsdaten von Prüfungsordnungen und dem Aufbau der Mehrfachstudiengänge (Lehramt). Das Altsystem wurde für nur-lesenden Zugriff konfiguriert, um beispielsweise Gebührenfragen für frühere Semester klären zu können, da diese nach Empfehlungen der HIS eG nicht migriert wurden.

## Vorläufige Studierende mit KIT-Account

Bewerbende auf einen Studienplatz bekommen bereits mit der Annahme eines Studienangebotes im Bewerbungsportal (BZM) ein vorläufiges Studierendenkonto in STU. Das gleiche gilt für zum KIT kommende Zeitstudierende (Incomings), die über die Software Mobility Online verwaltet werden (Abbildung 2). Dadurch wird ein eingeschränktes KIT-Konto im Identitätsmanagement erzeugt, welches die Anmeldung im Studierendenportal (Campus-System) und im Lernmanagementsystem ILIAS ermöglicht. Damit können neu ankommenden Studierenden die Semestergebühren per Lastschrift zahlen, einen Stundenplan zusammenzustellen, oder sich für Kurse in ILIAS anmelden. Mit der Immatrikulation in STU wird dann aus dem vorläufigen Studierendenkonto ein reguläres Studierendenkonto erzeugt, inklusive E-Mail-Postfach und KIT-Card. Voraussetzung dafür ist die Zahlung der fälligen Gebühren, der elektronische Nachweis der Krankenversicherung über das SMV-Verfahren (SCC-News 1/2021, [S. 13](#)) und ggf. noch die Nachreichung von für die Immatrikulation notwendige Unterlagen. Im Studierendenportal wird der konkrete Studiengang zugeordnet, so dass ab dann auch reguläre Prüfungsanmeldungen möglich sind.

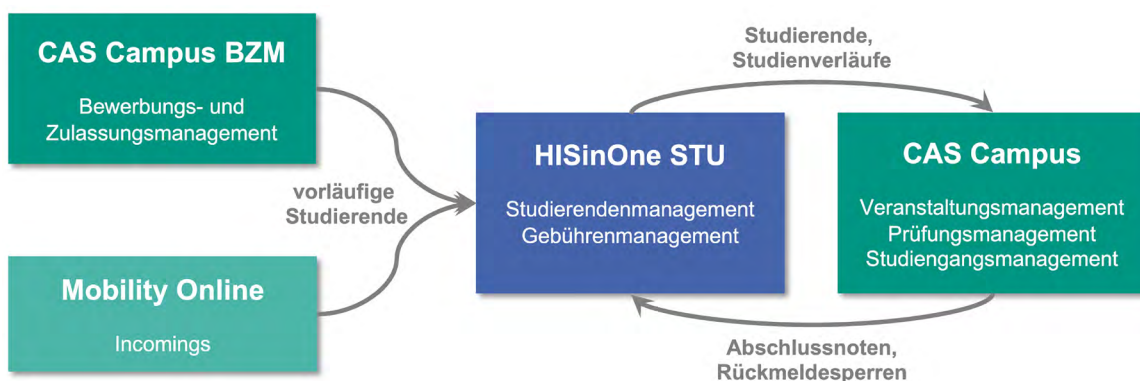


Abbildung 2: Datenübertragungen zwischen CAS Campus, Mobility Online und HISinOne



## Gebührenmanagement

Mit der Produktivsetzung von STU übernahm der Studierendenservice federführend die Bewirtschaftung des KIT-Kontos für studentische Zahlungen. Dies umfasst Lastschriften, Überweisungen, Rückerstattungen und Irrläufer. Die hierfür erforderlichen Konfigurationen im Modul STU wurden mit dem Studierendenservice, dem International Students Office, dem Finanzmanagement des KIT und der HIS eG eng abgestimmt. Zukünftig sollen auch elektronische Zahlungen ermöglicht werden (ePayment), die Anbindung ist in HISinOne bereits vorbereitet.

Mit der Erhebung der Gebühren gehen auch Anträge auf Minderungen, Erlass und Erstattung sowie die Fristverlängerung für Prüfungen, ebenso wie die Anträge auf Beurlaubung und Exmatrikulation einher. So wurden allein für Gebührenänderungen 46 Antragsvorlagen im System erstellt. Die Umstellung weiterer Antragsvorlagen ist in Planung. Ziel ist es, dass die Studierenden diese Anträge in Zukunft online stellen können.

## Berichtszentrum

Ein großer Vorteil von HISinOne-STU besteht in der Verwaltung der Bescheide. Die Software hat den manuellen und ressourcenintensiven Prozess der Papierakte für Immatrikulationsbescheinigungen und Gebühren abgelöst. Durch die detaillierte Dokumentation des Ausstellungsprozesses in STU kann dieser nun rechtssicher online erfolgen.

Der zweite Schritt soll diesen Ablauf vervollständigen und den Abruf der Dokumente über das Studierendenportal realisieren. Dies wird den Arbeitsablauf der Kolleginnen und Kollegen immens vereinfachen und eine große Zeitersparnis mit sich bringen.

HISinOne bietet individuelle Gestaltungsmöglichkeiten der Bescheide. Damit konnten die bisherigen Vorlagen gemäß den Gestaltungsrichtlinien übernommen und optimiert sowie die Anzahl der Dokumente reduziert werden.

## Business Intelligence und Statistiklieferungen

Im Zuge der Einführung von HISinOne wurde auch SuperX, die KIT-weite Berichtssoftware für statistische Daten, durch die in HISinOne-inte-

grierte Business Intelligence (BI) ersetzt. Dabei handelt es sich nicht um eine neue Software, sondern die BI ist SuperX in „neuem Gewand“. Das Layout der Benutzeroberfläche ist komplett überarbeitet, die auswählbaren Berichte, Datenstrukturen und -verarbeitungsprozesse sind erhalten geblieben. Daher war es möglich die SuperX-Datenbank mit ihrem umfangreichen Datenstand – bis auf einige Anpassungen – zu übernehmen.

Die BI importiert nächtlich die Daten aus der STU-Datenbank und bereitet sie mit einer von HIS bereitgestellten Software für die Berichtsfunktionen auf. So stehen den Nutzenden immer aktuelle Daten zur Verfügung. Da am KIT für die Abwicklung der Bewerbungsprozesse kein HIS-Produkt, sondern CAS Campus BZM verwendet wird, musste eine eigene Schnittstelle entwickelt werden, mit der die Daten aus BZM extrahiert und in verschiedenen Transformationsprozessen in eine von BI verarbeitbare Form gebracht werden.

Derzeit greifen Fakultäten sowie Mitarbeitende aus der Abteilung Strategisches Controlling und Reporting auf die BI-Berichte zu. Momentan laufen Vorbereitungen, um im Wintersemester 24/25 die Meldung der amtlichen Studierenden- und Prüfungsstatistik an das Statistische Landesamt zum ersten Mal mit der BI durchzuführen. |

Bianca Bauß, Thomas Berendonck, Felix Hintersehr,  
Susanne Kornmüller, Jana Trummer-Wilke

### **INTRODUCTION OF HISINONE AT KIT**

In close cooperation with HIS eG, SCC introduced the new campus management software HISinOne at KIT from August 2022 to October 2024. HISinOne is an integrated, web-based campus management software for universities. All student data is recorded and stored centrally and is available to various departments as a data basis. A particular challenge was the interaction between HISinOne and CAS Campus, as the two software products serve different aspects at KIT. Therefore, a corresponding integration between HISinOne and CAS Campus had to be developed at SCC. A comprehensive reporting system was also implemented.

# textS and textM: Languages for modeling and simulation

Development and deployment of complex models using high performance computing resources is a time-consuming and elaborate process that requires knowledge of many tools. A new family of domain-specific languages and supporting tools tremendously facilitates this process. This has been demonstrated in a use case of computational materials science.

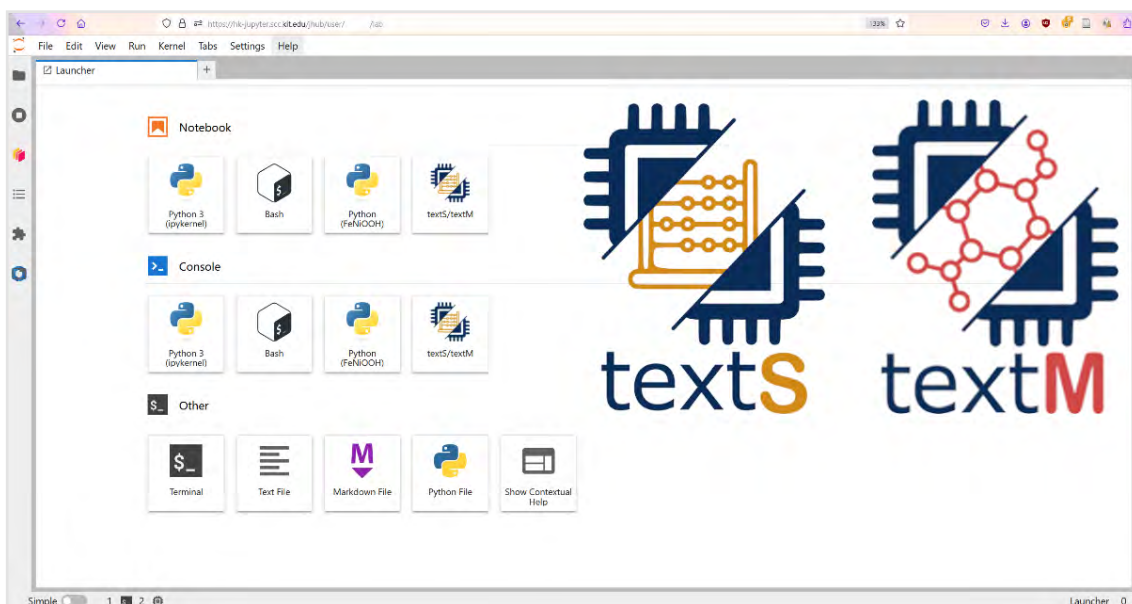


Figure 1: The Jupyter interface to textS/textM interpreter using the [JupyterHub service for HoreKa](#)

Besides parallel performance and scalability, ensuring the findability, accessibility, interoperability, and reusability (FAIR) of data produced by computer models and by their individual components has become a key requirement to modern-day computer simulations. The FAIR principles can be effectively fulfilled using scientific workflows and workflow management systems (SCC-News 1/2021, [p. 35](#)). However, the practical usability of the workflow approach is limited, affecting also the productivity of the researcher. Experience has shown that both, supercomputer users and operators, are reluctant to use workflow management systems, while the majority of computing projects still rely on the canonical Secure Shell/Bash/Slurm-Script approach that rarely complies with the FAIR data principles. From the point of view of a researcher in this field, the main reasons for such reluctance originate from the high effort required to learn and set up the tools, to develop and run complex models, and to analyze the results. On the other hand, the domain user is, most of the times, interested in the outcomes of the simulations rather than the underlying computational technicalities through which such results were achieved: their relevant scientific question is "what", not "how".

## **A Virtual Research Environment**

To address this issue, a project "Virtual Research Environment" (VRE) within the Helmholtz Joint Lab "Virtual Materials Design" was launched in 2021 (SCC-News 1/2021, [p. 38](#)). The first result of the project has been the [VRE Middleware package](#), which integrates several components from the workflow management system FireWorks and the workload management system Slurm to create a simplified platform. The VRE Middleware provides a lightweight application-programming interface (API) in Python for use in Jupyter, as well as a Jupyter-based graphical user interface (GUI). The second result from the project is a family of declarative, domain-specific languages for the VRE Middleware platform, equipped with several supporting tools, such as an interpreter, a console app, and a Jupyter kernel. These language grammars and supporting tools are also provided as a package, which has been named VRE Language. Both [VRE packages](#) are housed under the VirtMat Tools project group, which is currently in beta development stage, and released as open source.

## The textS Language

The first member of the VRE Language family, named textS, is a scientific computing language that integrates basic concepts such as types, e.g. scalars and common data structures (tables, series, arrays, etc.), expressions and functions, and physical units. Additionally, a parser is generated on the fly from the provided grammar. From the textual user input, the parser creates the input for the interpreter which interfaces to the VRE Middleware platform to create a persistent model, stored in a MongoDB database. The statements within the model can then be executed either interactively, in Jupyter (Figure 1), or via Slurm. Moreover, the user can extend or revise the model at any time by reloading it into an interactive session, either via the console app or Jupyter, and writing additional statements. This feature is especially useful for data post-processing, analysis and visualization purposes. The textS language also allows users to “tag” statements of a model as batch-type jobs by adding resource annotations. These annotations instruct the interpreter to convert the statements to batch workflow nodes, which in turn are converted to Slurm jobs with the required resource specifications. Some operations, such as filter, map, and reduce can be executed as parallel jobs using such annotations.

## Materials Modeling with the textM Language

The other member of the family is the textM language, which is a superset of textS, and includes concepts from the domain of materials modeling. The core concepts of atomic structure, calculator, and constraints employed by textM are inspired by the Atomic Simulation Environment (ASE), a Python package used in the back end of the textM interpreter. At the outset, the development of textM was driven by a single use case: the high-throughput screening of electro-catalysts for oxygen reduction and evolution reactions, which are essential in the design and operation of fuel cells, as well as the production of clean/green hydrogen. The usability and the benefits of textM, compared to the more widespread Bash-Slurm or pure-workflow approaches, have been thoroughly demonstrated for this use case.

## Further Developments and Outlook

Currently, the VirtMat Tools are being further developed and used in two [NHR](#) computing projects on HoreKa (ca. 10 million core hours), both addressing materials modeling topics. This is the first large-scale production deployment of the VirtMat Tools. On the development side, current work is focused on making the grammar and the interpreter architecture modular to enable the use of textS, as base, for the development of further languages in other domains of computational science. Additionally, development work is also aimed at enriching the Jupyter kernel with features to further improve usability, such as syntax highlighting, instant syntax checking, and auto-completion. Future work will include the integration of uncertainty quantification which will support representing simulation data with uncertainties via an extension of the Quantity datatype and enable mathematical operations and data analyses on such data.

For those interested, our [team offers support](#) for the VirtMat Tools packages. NHR users employing the VirtMat Tools in their computational projects on HoreKa can contact us via the [NHR support portal](#). For more elaborate use cases, we offer consulting services via the [SCC voucher system](#). |

Rodrigo Cortés Mejía, Ivan Kondov

## TEXTS UND TEXTM: SPRACHEN FÜR MODELLIERUNG UND SIMULATION

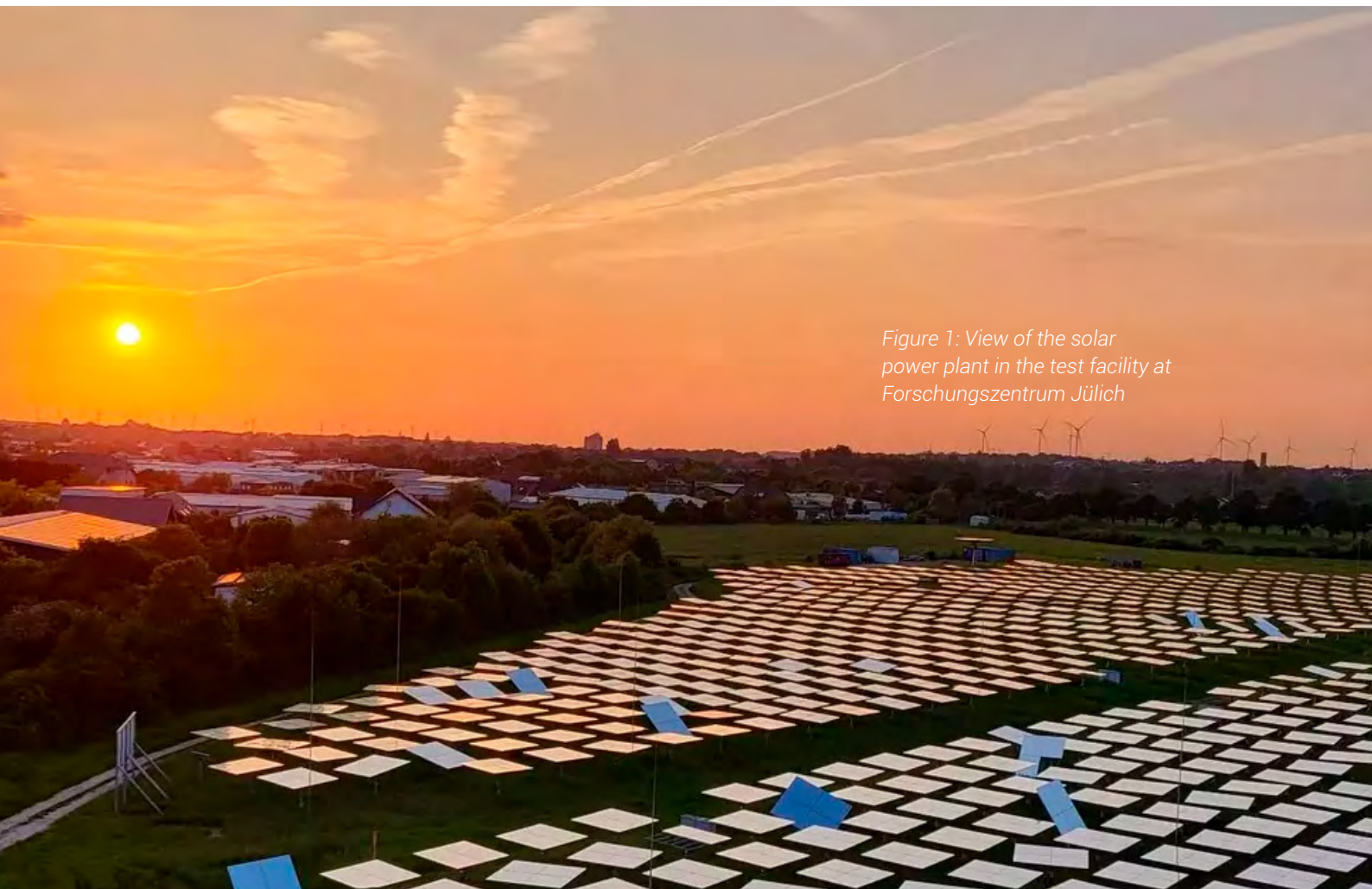
Die Auffindbarkeit, Zugänglichkeit, Interoperabilität und Wiederverwendbarkeit (FAIR) von Daten, die von komplexen Computermodellen und ihren einzelnen Komponenten erzeugt werden, sind wichtige Anforderungen. Die Entwicklung und der Einsatz solcher Modelle unter Verwendung von Hochleistungsrechenressourcen ist ein zeitaufwändiger und komplizierter Prozess, der die Kenntnis mehrerer Werkzeuge erfordert, wie der Shell-Sprache Bash, des Workload-Management-Systems Slurm, sowie eines Workflow-Managementsystems. Doch die praktische Anwendbarkeit von wissenschaftlichen Workflows und Workflow-Management-systemen (SCC-News 1/2021, [S. 35](#)) ist begrenzt, was sich auf die Produktivität der Forschenden auswirkt.

Um dieses Problem anzugehen, wurden im Rahmen des Helmholtz Joint Lab "Virtual Materials Design" (SCC-News 1/2021, [S. 38](#)) die Werkzeuge VirtMat Tools entwickelt und bereitgestellt, welche diesen komplizierten Prozess enorm erleichtern und gleichzeitig den transparenten Einsatz des Workload- und Workflow-Managementsystems ermöglichen. Diese wurden in zwei Komponenten umgesetzt und als Open-Source-Software zur Verfügung gestellt. Die [VRE Middleware](#) bietet eine leichtgewichtige Anwendungsprogrammierschnittstelle (API) in Python zur Verwendung in Jupyter sowie eine Jupyter-basierte grafische Benutzeroberfläche (GUI). Die zweite Komponente [VRE Language](#) ist eine Familie von deklarativen, domänenspezifischen Sprachen für die VRE-Middleware-Plattform, die mit verschiedenen unterstützenden Tools wie einem Interpreter, einer Konsolenanwendung und einem Jupyter-Kernel ausgestattet sind.

Die Sprache textS wird für wissenschaftliches Rechnen eingesetzt, und implementiert grundlegende Konzepte wie Basistypen, Ausdrücke und Funktionen, aber auch physikalische Einheiten. Die Sprache textM baut darauf auf, um weitere Konzepte der computergestützten Materialforschung, wie atomare Strukturen, anzubieten.

# AI-driven heliostat optimization for solar thermal power plants

Solar thermal power plants work in a very simple way: thousands of heliostats – a fancy word for sun-tracking mirrors – reflect sunlight to generate heat, which can then be used for electricity production or industrial applications like cement manufacturing. These heliostats, however, are a significant cost factor in operating a solar thermal power plant. To address this, researchers from the German Aerospace Center (DLR), together with Helmholtz AI consultants from Jülich Research Center (FZJ) and KIT have developed a new AI-based method to easily detect irregularities in the mirrors. Their findings were published in Nature Communications [1].



*Figure 1: View of the solar power plant in the test facility at Forschungszentrum Jülich*



At a test facility in Jülich, operated by the German Aerospace Center (DLR), nearly 2,000 mirrors are aligned to reflect sunlight onto an absorber atop a tower (figure 1). These solar tower power plants can complement wind and photovoltaic energy as a renewable energy source. The solar energy they concentrate can be used to generate electricity, power thermal industrial processes, or even stored for use during nighttime or in calm wind conditions. Like other renewable technologies, solar thermal power plants face significant cost pressures. To stay competitive, cost-saving measures are essential. Given that heliostats are a key expense, optimizing their production and performance is crucial. Currently, the mirrors are not perfectly planar, leading to uneven heat distribution at the tower, requiring high safety margins and thus reducing efficiency. One needs to know precisely how much energy is being delivered at each point. Until now, no technology reliably provided this data, which poses challenges for plant operations.

### **AI algorithm simulates heliostat**

To solve this, the Helmholtz AI teams from the Jülich Research Center (FZJ) and the Karlsruhe Institute of Technology (KIT) at SCC collaborated with DLR. The team came up with the idea to apply a technique from AI, known as backpropagation, in the simulation of the heliostats. Backpropagation is an algorithm typically used to train neural networks. In the case of the concentrating solar power plants, however, it learns a model of the mirror surfaces. This surface model is then used to calculate solar reflections at the tower using ray tracing, a technique from computer graphics. With this backpropagatable ray tracing, it is possible to calculate how to adjust the mirror surface so that the computer simulation's reflections closely match those from images taken at the real solar tower. Unlike other AI methods, this approach requires minimal data – just a few images are enough to produce accurate predictions. The researchers call this a reverse method because the mirror surface, typically an input for simulation, is instead the output.

### **How cost can be reduced**

This new calculation method marks a significant step towards reducing the cost of solar power plants. According to a [U.S. Department of Energy report](#), decreasing the thickness of mirror material from four

to three millimeters could save up to three million dollars per plant. While the Jülich site is just a test facility, there could be in large-scale plants in Spain or Morocco, up to ten thousand mirrors, much larger than those in Jülich. Once the surface of each mirror is known, energy distributions can be precisely controlled through optimal alignment. The next step is an operational integration into plant operations. Potentials for future improvements are vast: the AI-team aims to account for alignment errors or dynamic deformations caused by factors like gravity and wind for an entire heliostat field.

Through their collaboration, the Helmholtz AI researchers, along with their DLR partners, have made a significant contribution to the advancement of green energy technologies. Their innovative approach not only enhances the efficiency and affordability of solar thermal power plants but also paves the way for more sustainable and scalable renewable energy solutions in the future. |

Markus Götz

## Referenzen:

[1] *Automatic heliostat learning for in situ concentrating solar power plant metrology with differentiable ray tracing;*

Max Pragmann, Jan Ebert, Markus Götz, und andere:

[doi.org/10.1038/s41467-024-51019-z](https://doi.org/10.1038/s41467-024-51019-z) (07/2024)

## **KI-GESTÜTZTE OPTIMIERUNG VON SPIEGELN ERMÖGLICHT KOSTENGÜNSTIGERE SOLARTHERMISCHE KRAFTWERKE**

In einer vom Deutschen Zentrum für Luft- und Raumfahrt (DLR) betriebenen Testanlage in Jülich (Foto) werden fast 2.000 Spiegel (sog. Heliostate) so ausgerichtet, dass sie das Sonnenlicht auf einen Absorber auf einem Turm reflektieren. Diese Solarturmkraftwerke können Wind- und Photovoltaikenergie als erneuerbare Energiequelle ergänzen. Die in ihnen konzentrierte Wärme kann zur Stromerzeugung, für thermische Industrieprozesse oder auch zur Speicherung für die Nutzung in der Nacht oder bei Windstille genutzt werden. Wie andere erneuerbare Technologien stehen auch solarthermische Kraftwerke unter erheblichem Kostendruck. Um wettbewerbsfähig zu bleiben, sind kostensparende Maßnahmen unerlässlich. Da die Heliostate einen wesentlichen Kostenfaktor darstellen, ist die Optimierung ihrer Produktion und Leistung von entscheidender Bedeutung. Derzeit sind die Spiegel nicht perfekt flach, was zu einer ungleichmäßigen Wärmeverteilung am Turm führt, die hohe Sicherheitsmargen erfordert und somit die Effizienz verringert.

Forschende des Deutschen Zentrums für Luft- und Raumfahrt (DLR) haben deshalb gemeinsam mit Consultants von Helmholtz.AI des Forschungszentrums Jülich (FZJ) und des SCC am KIT eine neue KI-basierte Methode entwickelt, um Unregelmäßigkeiten in den Spiegeln leicht zu erkennen. Ihre Ergebnisse wurden im renommierten Wissenschaftsjournal Nature Communications veröffentlicht [1].

# Überblick über die PUNCH4-NFDI-Recheninfrastruktur

Das PUNCH4NFDI-Konsortium (Particles, Universe, NuClei and Hadrons for the NFDI) vereint verschiedene deutsche Institutionen aus der Teilchen-, Astro-, Astroteilchen-, Hadronen- und Kernphysik, die beschlossen haben, ihre Expertise und Ressourcen zu bündeln, um die steigende Datenmenge und Rechenbedarf besser zu bewältigen. Um dies zu erreichen, hat das SCC innerhalb von PUNCH4NFDI eine föderierte Recheninfrastruktur entwickelt. Das Konsortium wird von der DFG gefördert und ist Teil der Nationalen Forschungsdateninfrastruktur (NFDI).

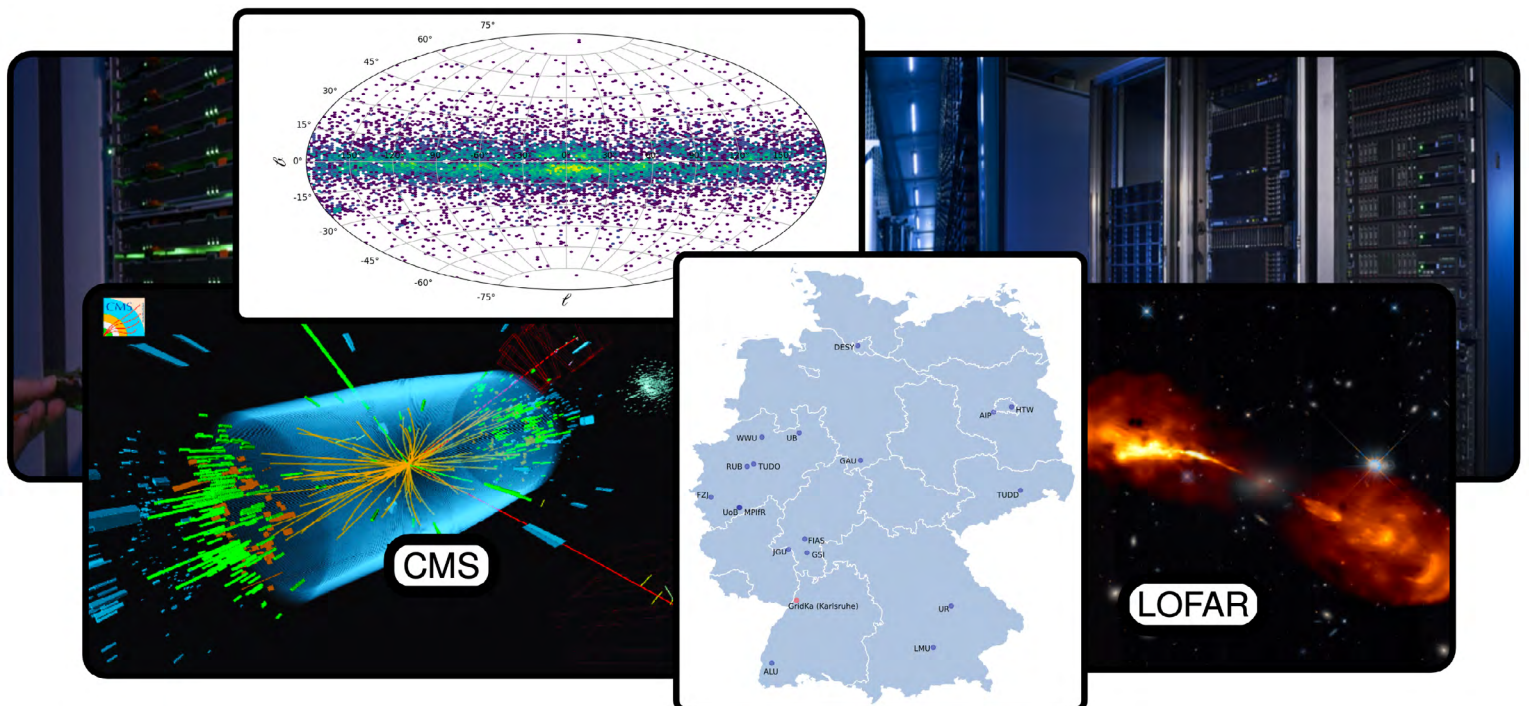


Abbildung 1: Verschiedene deutsche Institutionen aus der Teilchen-, Astro-, Astroteilchen-, Hadronen- und Kernphysik bilden das PUNCH4NFDI-Konsortium.

## Föderation der Rechenressourcen

Die föderierte Recheninfrastruktur des PUNCH4NFDI-Konsortiums (Abbildung 1), Compute4PUNCH, bietet den teilnehmenden Institutionen einen nahtlosen, föderierten und standardisierten Zugang zu den Rechen- und Speicherressourcen und deckt die Vielfalt ihrer Rechenanforderungen ab. Dies wird durch den Einsatz modernster Technologien erreicht, die kürzlich vom KIT und dem SCC für die Rechen- und Speicherinfrastrukturen der Hochenergiephysik-Gemeinschaft entwickelt wurden. Rechenressourcen für High-Throughput- (HTC), High-Performance- (HPC) und Cloud-Computing sind sehr heterogen und zeichnen sich durch eine Vielzahl von Betriebssystemen und Softwareumgebungen aus. Zudem sind diese Ressourcen bereits in Betrieb. Ihre Integration in Compute4PUNCH sollte daher die Anzahl der notwendigen Änderungen auf der Betreiberseite minimieren.

Dieses Ziel wird auf folgende Weise erreicht: Die Rechenressourcen werden in einem Overlay-Batch-System (OBS) zusammengefasst, um einen einzigen föderierten Pool zu bilden, der von einem Meta-Scheduler abhängig vom aktuellen Rechenbedarf provisioniert wird. Das Batch-System [HTCondor](#), das eine dynamische Erweiterung seines Pools unterstützt, wurde ausgewählt, um das OBS einzurichten, und der am SCC entwickelte Meta-Scheduler [COBaID/TARDIS](#), um die Provisionierung sicherzustellen.

Die Integration einer Ressource (Abbildung 2) wird durch die Ausführung eines Platzhalter-Jobs – einer sogenannten Drohne – auf dieser Ressource erreicht. Jede Drohne repräsentiert eine Ressource im Pool – einen Worker-Node – die in der Lage ist, Aufträge auszuführen. Die Drohnen nutzen die [Apptainer-Container-Technologie](#), um Softwareumgebungen bereitzustellen. Der am SCC gehostete HTCondor-Central-Manager führt die Informationen über den Worker-Nodes zusammen. Am KIT sind zwei Compute-Cluster in Compute4PUNCH integriert. Das erste ist das lokale Analyse-Cluster [TOPAS](#), aus dem bis zu 8 NVIDIA V100 GPU bei Bedarf bereitgestellt werden können. Das zweite ist der [GridKa-Cluster](#), der PUNCH4NFDI bis zu 2.000 Kerne zur Verfügung stellt. Ressourcen werden auch von der Georg-August-Universität Göttingen, der Ludwig-Maximilians-Universität München, der Leibniz-Rechenzentrum Compute-Cloud und der Open Stack Cloud der Westfälischen Wilhelms-Universität Münster zur Verfügung gestellt.

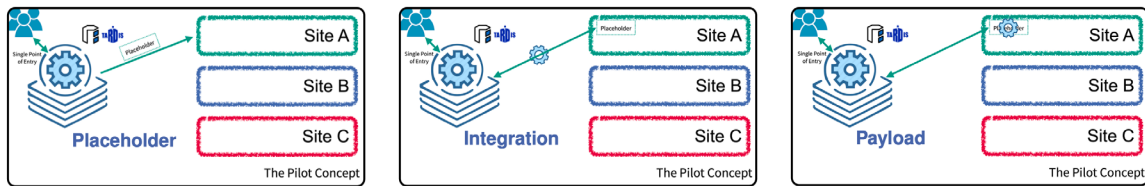


Abbildung 2: Integration einer Ressource in die PUNCH4NFDI-Recheninfrastruktur nach dem Drohnen-Konzept.

## Bereitstellung von Zugangspunkten

Die Ressourcen sollen dabei den Nutzenden transparent angeboten werden. Derzeit wird ein am SCC gehosteter Login-Knoten bereitgestellt, der mit einem HTCondor-Scheduler die Warteschlange der Rechenaufträge verwaltet und die Anfrage nach Ressourcen stellt. Der Zugang zum Login-Knoten basiert auf dem [Open ID Connect](#) (OIDC) Protokoll und nutzt die Helmholtz Authentifizierungs- und Autorisierungs-Infrastruktur ([Helmholtz-AAI](#)) zur Authentifizierung. Mit diesem Single-Sign-On-Verfahren ist auch der transparente Zugang zu den weiteren Instanzen sichergestellt. Der Authentifizierungsmechanismus kann wie folgt beschrieben werden: Auf der Client-Seite registrieren sich die Nutzenden beim Helmholtz-AAI-Provider – eine Mitgliedschaft in der Helmholtz-Gemeinschaft ist hierfür nicht erforderlich – und konfigurieren den [oidc-agent](#) über ihr Helmholtz-AAI-Konto, um Access-Token in ähnlicher Weise wie SSH-Schlüssel zu handhaben. Die Verbindung zum Login-Knoten wird dann mit dem am SCC entwickelten [mccli-Client](#) hergestellt. Auf der Server-Seite läuft auf dem Login-Knoten der am SCC entwickelte [motley cue-Dienst](#), der föderierte OIDC-Identitäten auf lokale Identitäten abbildet, und das [pam-ssh-oidc-Modul](#), das Access-Token für die Authentifizierung akzeptiert.

## Bereitstellung von Softwareumgebungen

Die Bereitstellung spezifischer Softwareumgebungen basiert auf der [Apptainer-Container-Technologie](#) und der Verwendung des CERN Virtual Machine File System [CVMFS](#). Ein CI/CD-Workflow erstellt die Analyse-Container und lädt sie in eine dedizierte GitLab-Registry hoch. Die Container werden zunächst in das Apptainer-Sandbox-Format konvertiert und der Recheninfrastruktur über das CVMFS-Repository hochskalierbar zur Verfügung gestellt. Die Nutzenden müssen nur den spezifischen Container angeben, um ihren Workflow auszuführen.

Mehrere Workflows wurden auf Compute4PUNCH getestet. Unter anderem die Kalibrierung der Daten des [LOFAR Radioteleskops](#) durch die Gruppe der Thüringer Landessternwarte (TLS) und die Datenreduktion des [MeerKAT Radioteleskops](#) durch die Gruppe der Universitätssternwarte München (USM).

## Verwaltung von Access-Token

Der Zugriff auf die PUNCH4NFDI-Speicherressourcen, Storage4PUNCH, basiert ebenfalls auf dem OIDC-Protokoll und verwendet den Helmholtz-AAI-Provider zur Authentifizierung. Die Access-Token haben eine Lebensdauer von etwa einer Stunde. Da dieser Wert kürzer ist als die durchschnittliche Laufzeit eines Jobs, musste ein Mechanismus in HTCondor eingeführt werden, um die Access-Token auf den Worker-Nodes zu aktualisieren. Der HTCondor Credential-Daemon (Credd) bietet dabei fortschrittliche Funktionen zur Aktualisierung von Access-Token durch die Verwendung von Credential Monitoring (CredMon) Plugins. Der Credd-Daemon ist unabhängig von der Art der Token und wird nur für deren Verteilung auf die Worker-Nodes verwendet. Die CredMon-Plugins sind je Token-Art spezifisch und für deren Aktualisierung zuständig. Daher musste ein CredMon-Plugin entwickelt werden, um die OIDC-Access-Token zu aktualisieren. Dieses Plugin nutzt einen am SCC entwickelten Dienst, den [Mytoken-Dienst](#), der langlaufende Rechenaufträge auf einfache und sichere Weise mit OIDC-Access-Token ausstattet. Der Mytoken-Dienst stellt Token-Artefakte bereit, die als Mytoken benannt werden. Mit diesen können neue Access-Token bereitgestellt werden, ohne auf eine Aktion der Nutzenden zurückgreifen zu müssen. Der eigentliche Ablauf wird in Abbildung 3 dargestellt. Ein Plugin, der [Credential Producer](#), wird während der Auftragsübermittlung aufgerufen, um den User aufzufordern, ein Mytoken zu erstellen, indem er sich einmal beim Mytoken-Webdienst authentifiziert. Das Mytoken wird sicher auf dem Submit-Node gespeichert und zur Erstellung des ersten Access-Token verwendet. Dieses Access-Token wird ebenfalls auf dem Submit-Node gespeichert und dem HTCondor-Rechenjob zur Verfügung gestellt. Das Mytoken, das sich nur auf dem Submit-Node befindet, ist nicht weltweit sichtbar. Es kann daher über einen langen Zeitraum, in der Regel eine Woche, verwendet werden, um die Access-Token zu aktualisieren.

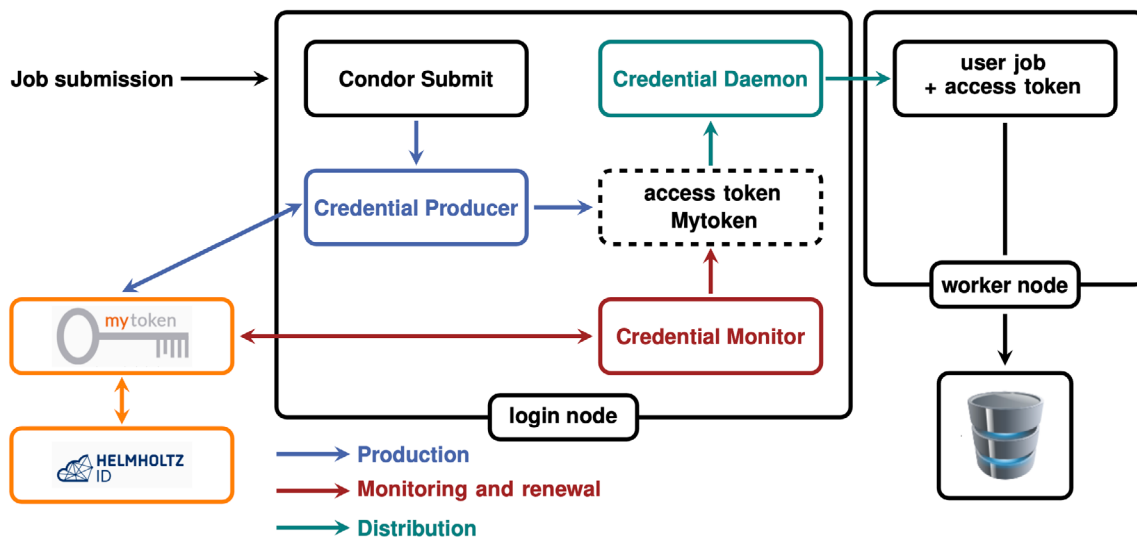


Abbildung 3: Implementierung der Verwaltung von OIDC-Access-Tokens in der HTCondor Software Suite.

Ein weiteres Plugin, der [Credential Monitor](#), überprüft regelmäßig die Gültigkeit der Access-Tokens und erneuert diese, wenn sie ablaufen, durch einen vom Mytoken-Dienst vermittelten OIDC-Flow. Die neuen Access-Tokens werden vom Credd-Daemon an die Rechenjobs verteilt. Dieses Verfahren gewährleistet den Nutzenden einen transparenten Zugriff auf Storage4PUNCH. Das beschriebene Access-Token-Management setzen auch andere Institutionen außerhalb des PUNCH4NFDI-Konsortiums ein – beispielsweise die [DARWIN-Kollaboration](#), während ihr Einsatz beim Rechenzentrum des Nikhef (Nationales niederländisches Forschungszentrum für subatomare Physik) noch in Arbeit ist.

### Was wurde erreicht, was ist noch geplant?

Die Compute4PUNCH-Infrastruktur ist in Betrieb und bietet eine neuartige Föderation von verteilten Rechenressourcen. Die weitere Integration neuer Ressourcen ist im Gange. Compute4PUNCH wurde schon für verschiedene PUNCH4NFDI-Rechenabläufe genutzt. Die Token-Verwaltung wurde entwickelt und in die HTCondor-Suite integriert. Am SCC wird im [IAM4NFDI](#) Base4NFDI-Projekt eine AAI-Infrastruktur entwickelt, die als Dienst für die gesamte NFDI bereitgestellt wird. Die Zukunftspläne umfassen die Unterstützung von Compute4PUNCH in der [REANA-Analyseplattform](#), sowie die Bereitstellung gemeinsamer Home-Verzeichnisse basierend auf [Nextcloud](#). |

Benoit Roland und Manuel Giffels



## OVERVIEW OF THE PUNCH4NFDI COMPUTE INFRA- STRUCTURE

The PUNCH4NFDI federated compute infrastructure, Compute4PUNCH, has been presented. The compute resources are federated as follows. A single overlay batch system based on HTCondor defines a single pool of resources whose provisioning is ensured by a COBaID/TARDIS meta-scheduler. An entry point running the HTCondor Software Suite enables the users to submit jobs to the compute infrastructure. The access to the entry point is standardised using access tokens based on the OIDC protocol and provisioned by the Helmholtz AAI provider.

The scalable provisioning of software environments is based on the Apptainer container technology and the use of the CERN Virtual Machine File System CVMFS. The refreshment of the access tokens required to access the PUNCH4NFDI storage resources, Storage4PUNCH, is based on the Mytoken service that allows to refresh the access tokens without resorting to the users. Its integration in HTCondor ensures the management of the access tokens in a way transparent to the users.

# Forschungsdatenmanagement in der Praxis

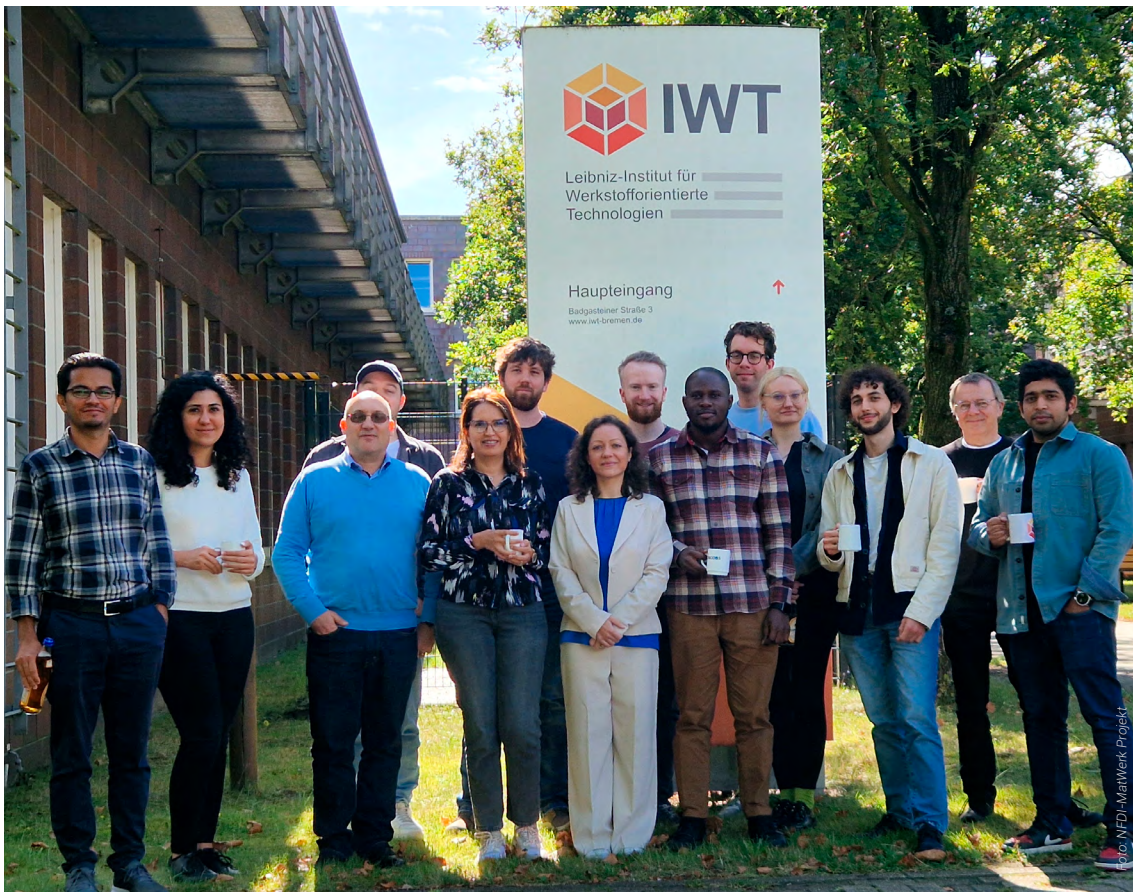


Abbildung 1: Gruppenbild der Teilnehmenden an der Summer School.

Die Erfassung und Verwaltung von Forschungsdaten und Metadaten sind ein wesentlicher Bestandteil des Forschungsprozesses. Wie kann man Metadaten erstellen? Wie können die Forschungsdaten und Metadaten publiziert werden? Wie werden die FAIR-Prinzipien effektiv in der Praxis umgesetzt? Welche Dienste können den Forschenden helfen, diese Ziele zu erreichen? Diese Fragen wurden im Rahmen der NFDI-MatWerk Summer School beantwortet.

Die Beschreibung von Forschungsdaten durch Metadaten ist ein zentraler Bestandteil des Forschungsprozesses. Metadaten bieten Kontext und Informationen zu den Daten und ermöglichen deren Nutzung, Auffindbarkeit und Wiederverwendbarkeit. Das SCC stellt verschiedene Dienste für das Forschungsdatenmanagement zur Verfügung, um die Qualität der Forschung zu verbessern und den Forschenden die Verwaltung ihrer Daten zu erleichtern.

Im Rahmen von [NFDI-MatWerk](#), dem Konsortium der Nationalen Forschungsdateninfrastruktur für Materialwissenschaft und Werkstofftechnik, fand die [NFDI-MatWerk Summer School - Forschungsdatenmanagement in der Materialwissenschaft und Werkstofftechnik](#) vom 10. bis 12. September 2024 in Bremen statt (Abbildung 1). Ziel der Veranstaltung war es, Forschende der Materialwissenschaft und Werkstofftechnik anzuleiten, [FAIR-Prinzipien](#) effektiv in der Praxis umzusetzen und sie dafür an das Angebot der NFDI-MatWerk heranzuführen.

### Inhalte der Summer School

Der Verlauf der Präsentationen orientierte sich am Use Case „Wie kann ich vorgehen, um meine Daten, basierend auf den FAIR-Prinzipien, effektiv zu nutzen?“. Ziel war es, den Teilnehmenden konkrete Ansätze zu zeigen, wie sie ihre alltäglichen Herausforderungen im Umgang mit Forschungsdaten bewältigen können. Die Vorträge enthielten eine Mischung aus Theorie und Praxis. Zuerst wurde der Vortrag „[The journey towards Metadata Management](#)“ präsentiert. Neben Grundlagen im Metadatenmanagement und von JSON-Schemata, umfasste der Vortrag auch ein Tutorial, in dem die Teilnehmenden lernten, selbst ein JSON-Metadatendokument zu erstellen. Anschließend wurde der praktische Teil „[Metadata Management in practice using MatWerk tools](#)“ vorgestellt. Der Vortrag führte die von SCC entwickelten und betriebenen Werkzeuge zur Erstellung und Verwaltung von Metadaten ein. Die Dienste wurden mit Hilfe von Hands-on Tutorials von den Anwesenden vor Ort ausprobiert. Die Teilnehmenden waren sehr interessiert an diesen Themen, was durch die aktive Mitarbeit und zahlreiche Detailfragen zum Ausdruck kam.

Schließlich wurde eine Umfrage durchgeführt, die ein durchweg positives Feedback der Teilnehmenden zeigte. Das Feedback unterstrich, dass die Kombination aus Theorie und Praxis gut ankam und die Teilnehmenden wertvolle Erkenntnisse gewonnen haben (Abbildung 2). |

Rossella Aversa, Sabine Chelbi



Abbildung 2: Ergebnis eines Teils der Umfrage

## RESEARCH DATA MANAGEMENT IN PRACTICE

The NFDI-MatWerk Summer School on Research Data Management in Materials Science and Engineering took place from 10 to 12 September 2024 in Bremen. The aim of this school was to guide researchers to put FAIR principles into practice focusing more on the research area Materials Science & Engineering. Two sessions were held, by two SCC members, including a combination of theory and practice. The first part focused on the basics of research data management as well as on the importance of metadata and on how to write JSON metadata documents. The second part included an introduction to different services for metadata management implemented by SCC, and hands-on tutorials to give the participants the opportunity to explore the tools and to actively engage with them. The final survey indicated positive feedback.

# „bwJupyter für die Lehre“ startet in die erweiterte Pilotphase

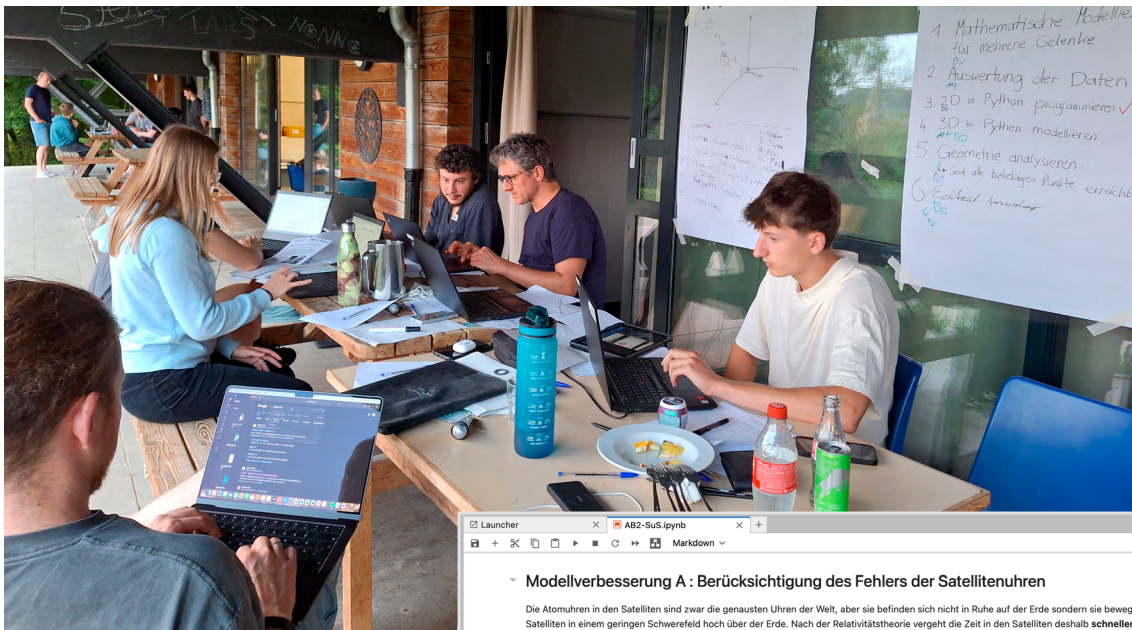
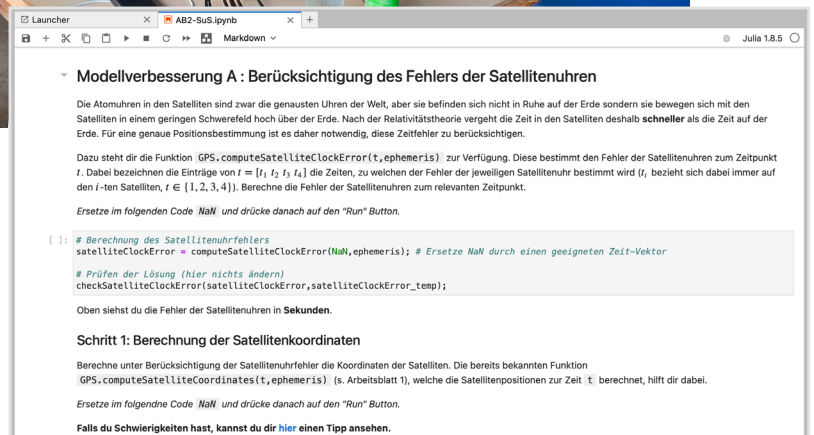


Abbildung 1: CAMMP-Schüler modellieren mit Jupyter (l.), Jupyter Notebook mit Aufgabenbeschreibung und Code (r.)



Nach dem erfolgreichen Start im Sommersemester 2024 geht der neue Landesdienst „bwJupyter für die Lehre“ im Wintersemester 24/25 in die zweite Pilotphase. An sechs Hochschulen im Land werden über 70 Lehrveranstaltungen den Dienst nutzen können. Parallel wird an einer Anbindung an die Lernplattformen ILIAS und Moodle gearbeitet. Für das Sommersemester 2025 ist eine Öffnung des Dienstes für alle Hochschulen in Baden-Württemberg geplant.

Computergestützte Modellierung und Simulation wird seit längerem nicht nur im naturwissenschaftlich-technischen Bereich eingesetzt, sondern findet Anwendung in fast allen Forschungsbereichen, von Sozial- und Geisteswissenschaften bis Medizin. Gerade der Einsatz der Künstlichen Intelligenz wächst rasant und deren Anwendungsmöglichkeiten sind schier endlos. Daraus ergeben sich neue Anforderungen an die Fertigkeiten der Absolventinnen und Absolventen aller Fachbereiche. Um die zahlreichen Tools effektiv nutzen zu können, muss die Hochschulausbildung neben fachspezifischen Themen auch Kenntnisse im Umgang mit den gängigen Programmiersprachen und deren Einsatz im computergestützten Rechnen umfassen. Damit dies gelingen kann, sollte der Einstieg möglichst niederschwellig gestaltet werden und die Handhabung einfach sein.

Diese Möglichkeit bietet die Open-Source-Software Jupyter. Die web-basierte interaktive Umgebung ermöglicht es den Anwendenden, Code der gängigsten Programmiersprachen zu testen und auszuführen, und das ohne Software auf dem eigenen Rechner zu installieren. Auch Daten können einfach verarbeitet und in anschaulichen Plots visualisiert werden. Da Programmcode und erklärender Text mit der web-basierten Software JupyterHub über sogenannte Jupyter Notebooks gleichzeitig genutzt werden können, ist dieses Tool besonders gut geeignet, um mit anderen Teams zu kooperieren, Software nachhaltig zu dokumentieren, oder Lehrprojekte zu initiieren. Im SCC werden im Rahmen der [CAMMP-Aktivitäten](#) bereits seit langem Jupyter Notebooks verwendet, um das interaktive Unterrichtsmaterial für Modellierungstage bereitzustellen und Schülerinnen und Schüler langsam an das wissenschaftliche Programmieren heranzuführen (Abbildung 1).

### Neuer Landesdienst „bwJupyter“

Um die Nutzung von digitalen, forschungsnahen Tools wie Jupyter Notebooks in der Hochschullehre zu verankern, wird das Projekt „bwJupyter für die Lehre“ seit 1. April 2024 im Rahmen des Dialogprozesses [Zukunftslabor: Hochschulen in der digitalen Welt](#) des Ministerium für Wissenschaft, Forschung und Kunst gefördert. Das Vorhaben ist eine Kooperation des SCC mit der Universität Stuttgart, mit dem Ziel bis Ende 2025 einen Landesdienst bwJupyter zu etablieren, der allen Hochschulen im Land zur Verfügung steht und den großflächigen Einsatz von Jupyter Notebooks in der Lehre ermöglicht.

Im Sommersemester 2024 wurde bereits die erste Pilotphase am KIT gestartet, bei der rund 20 Lehrveranstaltungen den Dienst testen konnten. Diese schnelle Umsetzung war möglich, weil auf bestehende Dienste und Infrastruktur wie den [JupyterHub](#) des bwUniClusters sowie die umfangreichen Erfahrungen mit Jupyter im HPC-Bereich zurückgegriffen werden konnte. Insgesamt versucht das Projekt so viel existierende Infrastruktur und Knowhow wie möglich einzubinden, um den Aufbau von unnötigen und kostspieligen Parallelstrukturen zu vermeiden. Innerhalb des SCC bringen gleich drei Abteilungen ihre Expertise ins Projekt mit ein. Ab 2025 soll der JupyterHub auf einer Kubernetes-Plattform mit eigener Hardware betrieben werden. Diese soll langfristig auch als Basis für weitere Dienste dienen und bei Bedarf ausgebaut werden. Ein potenzieller erster Kandidat ist bwGitLab, der sich gerade im Aufbau befindet.

### **Anbindung an Lernplattformen für Frühjahr 2025 geplant**

Um die Nutzung für Studierende und Lehrende so niederschwellig wie möglich zu gestalten, wird aktuell an einer Integration in die Lernplattformen ILIAS und Moodle gearbeitet. Sie soll es Lehrenden ermöglichen, vorgefertigte digitale Übungsblätter auf Basis von Jupyter Notebooks für ihre Kurse bereitzustellen und ebenso Zugriff auf die Arbeitsergebnisse der Studierenden zu erhalten.

Da verschiedene Fakultäten unterschiedliche Anforderungen an Jupyter Notebooks stellen, sollen im nächsten Jahr Varianten entwickelt werden, die Lehrende auch mit wenig Jupyter-Erfahrung als Blaupause nutzen können. |

Jasmin Hörter

## **"BWJUPYTER FOR HIGHER EDUCATION" ENTERS EXTENDED TEST PHASE**

Computer-aided modeling and simulation has long been used not only in the natural sciences and technology, but in almost all areas of research, from the social sciences and humanities to medicine. Especially in the rapidly growing field of artificial intelligence, the application possibilities are endless. To be able to use the numerous tools effectively, higher education must include not only subject-specific topics but also knowledge of common programming languages and the use of these in scientific computing. The open-source software Jupyter offers a low-threshold tool that enables users to test and execute code in the most common programming languages without having to install software on their own computer. As program code and explanatory text can be used simultaneously in the Jupyter Notebook, this tool is particularly suitable for cooperations in teams, documenting software sustainably or initiating teaching projects.

The project "bwJupyter for higher education" is a state-funded cooperation between SCC and the University of Stuttgart with the goal to establish a state-wide service bwJupyter by the end of 2025.

Following its successful launch during the summer term 2024, the new service "bwJupyter for higher education" will enter its second test phase during the winter term 24/25. Over 70 courses at six universities in Baden-Württemberg will be able to use the service. At the same time, work is underway to connect bwJupyter to the ILIAS and Moodle learning platforms. This will enable lecturers to provide ready-made Jupyter Notebooks and accompanying material for the relevant course and gain access to the students' work results as well.

The service will be open to all BW universities starting with the summer term 2025.



# MathSEE Modeling Week – Forschung im Curriculum



Abbildung 1: Rege Beteiligung an der neu aufgelegten MathSEE Modeling Week 2024.

Nach einer zweijährigen Pause hat das SCC dieses Jahr die MathSEE Modeling Week fortgeführt. Über 30 Bachelor- und Master-Studierende verschiedener Studiengänge arbeiteten in kleinen Teams an aktuellen Forschungsfragen rund um Modellbildung, Simulation, Hochleistungsrechnen und Unsicherheitsquantifizierung. Ein großer Dank geht an die Einreichenden für die spannenden Themenbeiträge von Galvanotechnik über Materialwissenschaft bis zu Teilchenphysik.

Mit großzügiger Unterstützung des KIT-Zentrums [MathSEE](#) (Mathematics in Sciences, Engineering, and Economics) hat das SCC nach einer zweijährigen Unterbrechung eine Neuauflage der MathSEE Modeling Week angeboten.

## Modeling Week

Nach einer kurzen Einführung in die mathematische Modellierung und Unsicherheitsquantifizierung konnten sich die Studierenden (Abbildung 1) schon am ersten Tag mit den Anbietenden diverser Forschungsthemen aus verschiedenen KIT-Instituten austauschen. Direkt im Anschluss stiegen die Teams in ihr jeweiliges Thema ein. Im Verlauf der Woche entwickelten sie mathematische Modelle, implementierten diese in Software und führten statistische Analysen durch. Dabei konnten sie damit nicht nur einen Einblick in aktuelle Forschung erhalten, sondern auch praktische Erfahrung in interdisziplinärer Zusammenarbeit sammeln (Abbildung 2). Abschließende Präsentationen und Berichte stellten sicher, dass die erzielten Ergebnisse im jeweiligen Institut für die weitere Verwendung zur Verfügung stehen.

## Projekte

Dank spannender [Themenbeiträge](#) aus verschiedenen wissenschaftlichen Disziplinen am KIT konnten die Teilnehmenden an einer großen Bandbreite von Themen arbeiten: Von der Inversion von Elektronenbündeln in einem Teilchenbeschleuniger (Felipe Donoso, Institute for Beam Physics and Technology) über die Modellierung galvanischer Prozesse (Moritz Dorn, Institut für Regelungs- und Steuerungssysteme), die Unsicherheitsquantifizierung in Materialdefekten (Sing-Huei Lee, Institut für Angewandte Materialien) und Sternentstehungsmodellen (Louise Kluge, SCC), bis hin zur Modellierung von Multilevel-Konvertern (Niklas Katzenburg und Lars Leister, Elektrotechnisches Institut).

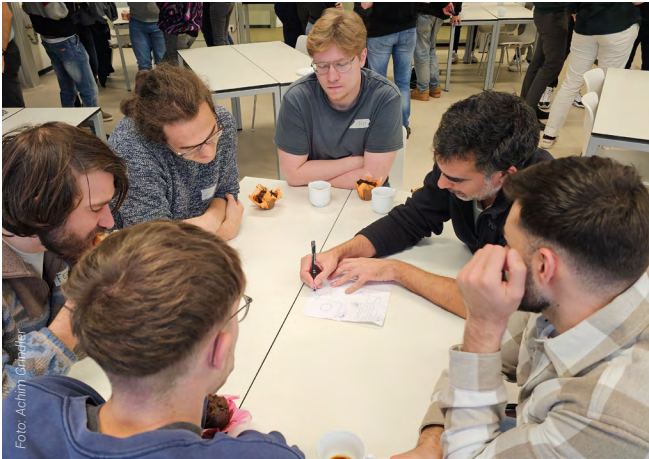
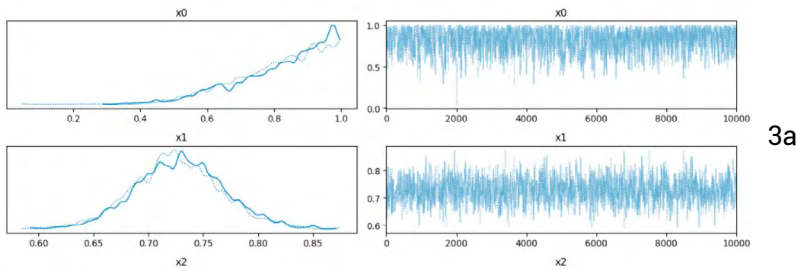


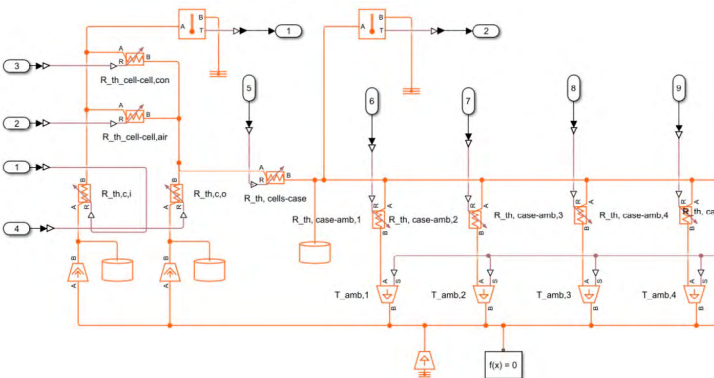
Abbildung 2: Während der Woche: Intensive Teamarbeit und enger Austausch mit den Anbietern der Forschungsthemen.

Trotz des sehr straffen Zeitfensters konnten die Studierenden hervorragende Ergebnisse erzielen. Dies wurde unter anderem durch die universelle Schnittstelle [UM-Bridge](#) ermöglicht, die in der Implementierung eine effektive Aufgabenteilung in Modellierung und Unsicherheitsquantifizierung erlaubt.

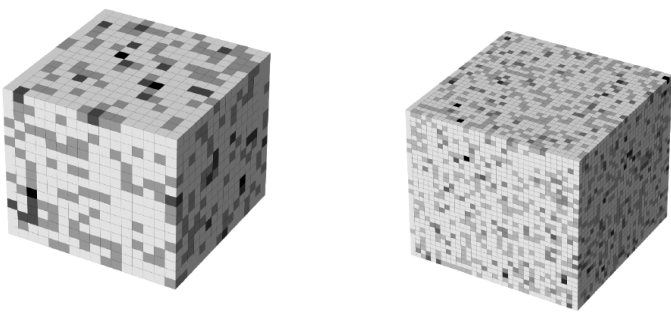
So konnte ein Team erfolgreich die Parameter eines astrophysikalisch motivierten Modells über Bayes'sche Inferenz bestimmen (Abbildung 3a, oben), während ein anderes Team einen Multilevel-Konverter mathematisch modellierte (3b, Mitte) und die wichtigsten Faktoren zur Wärmeentwicklung identifizierte. Eine weitere Gruppe befasste sich wiederum mit der Modellierung zufällig verteilter Materialparameter und erweiterte eine aktiv entwickelte Simulationssoftware um eine Poisson-Verteilung (3c, unten).



3a



3b



3c

Abbildung 3: (a) Parameterschätzung unter unsicheren Daten in einem Shock Tube-Modell, (b) mathematische Modellierung eines modularen Multilevel-Konverters sowie (c) Poisson-verteilte Materialparameter für Continuum-Dislocation-Dynamics-Simulationen.

## Ausblick

Sowohl von Studierenden als auch Themenstellern gab es sehr positive Rückmeldungen. Insbesondere weil die Modeling Week eine der wenigen Möglichkeiten darstellt, in einer Lehrveranstaltung intensiv an ungelösten interdisziplinären Forschungsfragen zu arbeiten, wird das SCC diese Veranstaltung auch in kommenden Jahren wieder anbieten. Das umfangreiche Lehrmaterial in Form von Tutorials für Grundlagen der Modellierung, Unsicherheitsquantifizierung sowie wissenschaftlicher Software wird unter einer Creative Commons-Lizenz veröffentlicht, so dass es auch für andere Kurse und Institutionen zur Verfügung steht. |

Sebastian Krumscheid, Linus Seelinger

### **MATHSEE MODELING WEEK – RESEARCH IN THE CURRICULUM**

After a two-year break, SCC continued the MathSEE Modeling Week. More than 30 bachelor's and master's students of various fields took part in the event. After a brief introduction in the relevant topics, they worked in small teams on open research questions spanning mathematical modeling, simulation, high performance computing and uncertainty quantification. Despite the short timeframe, they could make valuable progress, which in turn benefits research. Many thanks to the researchers from several KIT institutes contributing topics, spanning a wide bandwidth including electroplating, materials science and particle physics.

# Nadja Klein leitet neue Forschungsgruppe

**Seit August 2024 leitet Nadja Klein die Forschungsgruppe „Methods for Big Data“ am SCC. Sie forscht und lehrt an der KIT-Fakultät für Informatik.**

Mit einer gemeinsamen Berufung von Nadja Klein an die Fakultät für Informatik und das SCC konzentriert sich die Forschungsagenda von [Methods for Big Data](#) auf die Entwicklung innovativer statistischer und mathematischer Techniken, die die Vorteile von Bayesianischer Statistik und maschinellem Lernen gleichzeitig nutzen. Ziel ist es, die Robustheit von Modellen zu erhöhen, die Dateneffizienz zu verbessern und Unsicherheiten in komplexen Systemen zu quantifizieren.



Nadja Klein ist zudem Emmy-Noether-Forschungsgruppenleiterin und hat zahlreiche Auszeichnungen erhalten, darunter Mitgliedschaften in AcademiaNet, der Jungen Akademie und dem Humboldt-Netzwerk, die von der Alexander von Humboldt-Stiftung verliehen wird. Nadja Klein bringt sich darüber hinaus aktiv in der Nachwuchsförderung ein, z.B. als Vertrauensdozentin der Studienstiftung des deutschen Volkes. An der Georg-August-Universität Göttingen hat sie in Mathematik promoviert und war später als Feodor-Lynen-Stipendiatin an der University of Melbourne tätig. Bevor sie zum KIT kam, war sie Professorin für Statistik und Datenwissenschaft an der Humboldt-Universität zu Berlin. |

## **IMPRESSUM**

### **Kontakt**

Karlsruher Institut für Technologie (KIT)  
Scientific Computing Center (SCC)  
E-Mail: [contact@scc.kit.edu](mailto:contact@scc.kit.edu)  
[www.scc.kit.edu](http://www.scc.kit.edu)

### **Redaktion**

Achim Grindler (verantwortlich)  
Karin Rische  
E-Mail: [redaktion@scc.kit.edu](mailto:redaktion@scc.kit.edu)

### **Titelfoto**

Eindrucksvolles Morgenrot vor dem Gebäude des SCC  
am Campus Nord (Foto: Achim Streit)

### **Produktion**

Karlsruher Institut für Technologie (KIT)  
Campus Services (CSE) – Medienproduktion (MEP)  
Fotografie: Amadeus Bramsiepe, Markus Breig,  
Achim Grindler (SCC, KIT), Jessica Mitchell (FZJ)  
Gestaltung, Layout, Satz: Heike Gerstner, Nicole Gross  
[www.cse.kit.edu](http://www.cse.kit.edu)

### **Erscheinungstermin dieser Ausgabe**

Januar 2025

[www.scc.kit.edu/publikationen/scc-news](http://www.scc.kit.edu/publikationen/scc-news)

**Der Nachdruck und die elektronische Weiter-  
verwendung sowie die Weitergabe von Texten  
und Bildern, auch von Teilen, sind nur mit ausdrück-  
licher Genehmigung der Redaktion gestattet.**

---

### **Herausgegeben von**

Karlsruher Institut für Technologie (KIT)  
Präsident Prof. Dr. Jan S. Hesthaven  
Kaiserstraße 12  
76131 Karlsruhe  
[www.kit.edu](http://www.kit.edu)

Karlsruhe © KIT 2025