Rahmenkonzept

zum Einsatz der Informations- und Kommunikationstechniken (IuKT)

im Leibniz-Institut für Pflanzenbiochemie (IPB)

Inhaltsverzeichnis

INHALTSVERZEICHNIS 2

1. EINLEITUNG 4

2. WISSENSCHAFTLICHES KONZEPT 4

2.1. Schwerpunkte gegenwärtiger Forschung 5
2.1.1. Arbeitsgruppe Computerchemie 5
2.1.2. Arbeitsgruppe Bioinformatik 5
2.1.3. Vorhandene Computertechnik und Software 6

2.2. Planung 6
2.2.1. Horizontales Kompetenzteam wissenschaftliche Informatik 7
2.2.2. Ressourcenplanung 9
2.2.3. Softwareentwicklung 10
2.2.3.1. Richtlinien 10
2.2.3.2. Verwertung und Lizenzierung 10

2.3. Bibliothek 10

3. TECHNISCHES KONZEPT 11

3.1. Netzwerkdienste (Internet) 11
3.1.1. World Wide Web 11
3.1.2. FTP 12
3.1.3. Email 13
3.1.4. Datenbankdienste und Webservices 13

3.2. Netzwerkdienste (Intranet) 13
3.2.1. Interner Datenaustausch 14
3.2.1.1. Printserver 14
3.2.1.2. Intraweb 14
3.2.2. Firewall, HTTP-Proxy 14
3.2.3. DHCP, DNS, LDAP 15
3.2.4. Datenbanksysteme 15
3.2.5. Fileservices (Novell, Windows, NFS) 16
3.2.5.1. Wissenschaftliche Abteilungen 16
3.2.5.2. Verwaltung 17

3.3. Präsentationsmöglichkeiten 17

3.4. Beschaffung und Entsorgung von Hard- und Software 17
3.4.1. Beschaffung 17
3.4.2. Richtlinien für die Planung von IT-Vorhaben 18
3.4.3. Richtlinien für die Ausführung von IT-Vorhaben 19
3.4.4. Reparatur und Ersatz 19
3.4.5. Verschrottung 20

3.5. (Applikations-)Server 20
3.5.1. Die wissenschaftlichen Abteilungen 20
3.5.2. Verwaltung 20

3.6. Arbeitsplatzrechner 21
3.6.1. Hardwareausstattung für APCs 21

3.6.2. Softwaregrundausstattung für APCs 21
3.6.3. Spezialsoftware 21
3.6.3.1. Reference Manager (Endnote) 23
3.7. Mittelfristige Perspektiven 24
3.7.1. Server und Clients 24
3.7.2. Neuere Entwicklungen 24
3.8. Software 24
3.9. Netzwerkinfrastruktur 25
3.9.1. Netzwerktechnik 25
3.9.1.1. Passive Netzwerkkomponenten 25
3.9.1.2. Aktive Komponenten 26
3.9.2. Protokolle und Adressen 26
3.9.3. Sonstige Netzwerke 26
3.9.3.1. ISDN 26
3.9.3.2. WLAN 26
3.9.3.3. VPN 27
3.10. Sicherheit 27
3.10.1. Bedrohungsanalyse 27
3.10.2. Abwehrmaßnahmen 28
3.10.2.1. Abwehr von Diebstahl und Vandalismus 28
3.10.2.2. Abwehr von technischen Ausfällen 29
3.10.2.3. Abwehr von unautorisiertem Zugriff 29
3.10.2.4. Schutz vor Virenattacken 30
3.10.2.5. Die Firewall 30
3.10.3. Zusammenfassende Wertung 31
3.11. Datensicherung und –archivierung 31
3.11.1. Datensicherung für die Wissenschaft 31
3.11.2. Technische Datensicherung 32
3.12. Ausblick 34
3.13. Einsatz des IuKT-Personals und zentraler Service 34
4. SCHLUSSBEMERKUNGEN 35

1. Einleitung

Das vorliegende IT Konzept des IPB setzt sich aus zwei Teilen zusammen: dem wissenschaftlichen und dem technisch-organisatorischen Konzept.

Das technisch-organisatorische Konzept wird in erster Linie durch die Arbeitsgruppe EDV erstellt und gepflegt. Es beschreibt die Organisation der EDV-Infrastruktur, grundlegende Dienste und den wichtigen Punkt der Sicherheit.

Das Konzept zu den wissenschaftlichen Arbeiten und Zielen fokussiert auf die Bereiche der Bio- und Chemoinformatik. Mit dem Aufbau der Arbeitsgruppe „Bioinformatik und Massenspektrometrie" und den Kompetenzen in der Arbeitsgruppe „Computerchemie" in der Abteilung Natur- und Wirkstoffchemie zur Chemoinformatik, der Computer- und Quantenchemie sowie dem Proteinmodelling ergibt sich eine umfassende Strategie zur Entwicklung und Koordinierung verschiedenster Technologien der Informatik und Computeranwendungen in Chemie und Biochemie.

Diese Entwicklungen und Kompetenzen schließen u.a. Kooperationen mit Instituten der Martin-Luther-Universität, kleineren Pharmafirmen der Region, dem Bioinformatik-Centre Gatersleben-Halle und dem Netzwerk PlantMetaNet ein.

2. Wissenschaftliches Konzept

Die Anwendung der Methoden der Bio- und Chemoinformatik und des Molecular Modellings auf viele Fragestellungen in den Biowissenschaften (Proteomics, Metabolomics, Proteinmodelling, *in silico* screening, Ligandendesign etc.) gehört heute zum Standardrepertoire der wissenschaftlichen Praxis. Am IPB wird bereits eine Vielzahl von Methoden der Chemo- und Bioinformatik angewendet und weiterentwickelt. Daher ist es für das IPB von strategischer Bedeutung, die existierenden Kompetenzen in den verschiedenen Abteilungen miteinander zu verknüpfen und die entstehenden Synergien, etwa bei der Software- und Datenbankentwicklung, zu nutzen.

Die bereits bestehende Zusammenarbeit zwischen den Arbeitsgruppen Computerchemie (Abteilung Natur- und Wirkstoffchemie) und Bioinformatik (Abteilung Stress- und Entwicklungsbiologie) wird daher als Kristallisationskeim genutzt, um in den kommenden Jahren ein horizontales Kompetenzzentrum zu etablieren, das nationalem und internationalem Standard entspricht und dessen Know-how sowohl für die Mitarbeiter des Institutes als auch externen Wissenschaftlern zur Verfügung steht.

Die effektive Anwendung der wissenschaftlichen Informatik ist im entscheidenden Maße von der Leistungsfähigkeit der vorhandenen Rechentechnik abhängig und von abteilungsübergreifender Bedeutung für die wissenschaftlichen Arbeiten. Die speziellen Ressourcen (Rechnercluster, Datenbank- und Applikationsserver) sollen daher auch über einzelne Projekte hinaus gemeinsam genutzt und transparent in die IT-Landschaft des IPB integriert werden. Die wissenschaftliche Ausrichtung der einzelnen Arbeitsgruppen bleibt dabei erhalten.

2.1. Schwerpunkte gegenwärtiger Forschung

2.1.1. Arbeitsgruppe Computerchemie

Die Arbeitsgruppe Computerchemie wurde im Jahre 2001 in der Abteilung Natur- und Wirkstoffchemie gegründet und hat sich mittlerweile zu einem abteilungs- und institutsübergreifenden Kompetenzzentrum insbesondere für Proteinhomologiemodelling, quantenchemische Berechnungen und in *silico screening* entwickelt. So stehen der Arbeitsgruppe bereits heute Datenbanken mit über zwei Millionen Verbindungen zur Verfügung, aus denen etwa 100 Millionen 3D-Strukturen generiert werden konnten. Neben diesem Schwerpunkt werden moderne Methoden des Molecular Modellings und der Theoretischen Chemie zur Bearbeitung vielfältiger Fragestellungen in der Synthesechemie (Syntheseplanung) oder zur Analyse von Struktur-Wirkungsbeziehungen angewendet. In Arbeit ist die Entwicklung einer modernen Oberfläche für ein umfassendes Datenbanksystem, welches insbesondere Informationen über Naturstoffe (Phytobase), aber auch über in der Abteilung synthetisierte Verbindungen enthalten soll.

In Zusammenarbeit mit dem Institut für Informatik der MLU Halle wird ein 2D-NMR-Datenbanksystem aufgebaut, das ^{1}H- und vor allem auch ^{13}C-NMR-Daten über ^{1}H-detektierte heteronukleare 2D-NMR-Spektren für Metabolitenprofile, Fingerprinting, Clusteranalyse und Dereplikation zugänglich macht.

Eine steigende Bedeutung nimmt das relativ neue Gebiet der Chemoinformatik ein. Hierbei konzentriert sich die Arbeitsgruppe zunächst auf die Analyse von Naturstoffen und spektroskopischen Daten. Zunehmend werden dafür neue informatische Werkzeuge entwickelt.

2.1.2. Arbeitsgruppe Bioinformatik

Die Arbeitsgruppe Bioinformatik und Massenspektrometrie ist eine von vier Nachwuchsgruppen, die im Rahmen des Bioinformatik-Centre Gatersleben-Halle (BIC-GH) vom BMBF gefördert werden. Eine Weiterführung der Arbeitsgruppe durch das IPB ist auch für die Zeit nach Ablauf der Förderung des BIC-GH geplant.

Die Arbeitsgruppe beschäftigt sich primär mit der Analyse von Massenspektrometriedaten im Bereich der Metabolomforschung.

Der Bereich der Proteomforschung wird - aus Kapazitätsgründen - nicht aktiv bearbeitet. Es wäre jedoch sträflich, die (aus Sicht der Datenanalyse) eng verwandten Gebiete der Transkriptom- und Proteomforschung isoliert von Metabolomics zu betrachten, zumal insbesondere die Kooperationspartner am European Bioinformatics Institute (EBI) diese Gebiete primär bearbeiten. Daher kümmert sich die Arbeitsgruppe auch um die Installation der relevanten Proteomicssoftware und -datenbanken aus diesen externen Quellen. Da die Bioinformatik auf diesen Gebieten einige Jahre Vorsprung hat, können die dort entwickelten und bewährten Methoden für die Metabolomanalyse adaptiert werden. Eigenentwicklungen am IPB erhalten durch die Einbindung in den Standardisierungsprozess von z.B. Austauschformaten eine weite Sicht- und Anwendbarkeit in der Community.

2.1.3. Vorhandene Computertechnik und Software

Server
- 1 Datenbankserver Sun Blade 1000 (2*900Mhz UltraSparc III+; 2GB RAM; Solaris),
- 2 WebApplication- & Boot-Server (2,66 GHz Xeon-HT; 2 GByte RAM und 1,8Ghz AMD; 1GB RAM; Linux),
- 1 Fileserver (2,2 GHz Xeon; 1 GByte RAM; externes 2,4 TByte RAID-Subsystem).

Stereo-Grafikworkstations
- 3 SGI Octane (400 MHz R12000 CPU; 2,8 bzw. 1,0 GByte RAM; IRIX),
- 1 SGI Fuel (500 MHz R14000 CPU; 1 GByte RAM; IRIX),
- 5 PC-Workstations (3,2 GHz AMD64 CPU; 2 GByte RAM; Linux).

Linux-Computecluster
- 1 Quad-Opteron (Opteron 875 Dualcore-CPU; 16 GByte RAM),
- 13 Computeserver (7*Dual 2,66 GHz Xeon-HT; 2 GByte RAM, und 6* 2,0 GHz Pentium IV, 1 GByte RAM).

Alle Rechner mit Ausnahme des Fileservers (1 Gbit) sind über 100 MBit Ethernet verkabelt. Die lokalen Platten der Computeserver werden z.T. für das Betriebssystem und hauptsächlich für temporäre Daten der Jobs genutzt. Die Lastenverteilung zwischen den einzelnen Rechnerknoten erfolgt über das Queueingsystem NQS. Außerdem ist der Computecluster in das Institutsnetz integriert und wird vom zentralen Backupservice gegen Datenverlust abgesichert. Nutzeraccounts werden momentan noch mit NIS und LDAP verwaltet. Folgende kommerzielle Programmpakete werden in der Arbeitsgruppe Computerchemie genutzt::

- MOE — Molecular operating environment, Modellingsoftware von CompChem,
- SYBYL® 7.0 — Umfangreiches Modellingsoftwareprogrammpaket der Firma Tripos Inc.,
- Gaussian 03 — Programmpaket für *ab inito* Methoden,
- Schrödinger — Docking, pKa-Wertberechnugen (*ab initio*), QSWR u.a.,
- Spartan — Programmpaket semiempirischer Methoden,
- CAChe 5.0 — Programmpaket semiempirischer Methoden,
- GOLD — Ligand-Protein-Docking.

Abteilungsübergreifend werden verschiedene Module des Spektroskopie-/Chromatografie-Programmpakets ACD/Labs (Advanced Chemistry Development, Inc.) genutzt.

2.2. Planung

In den kommenden Jahren sollen verschiedene Maßnahmen umgesetzt werden, um die Effizienz der wissenschaftlichen Arbeit weiter zu steigern.

2.2.1. Horizontales Kompetenzteam wissenschaftliche Informatik

Beide oben genannte Arbeitsgruppen werden insbesondere bei der Entwicklung von diversen Datenbanken eng zusammen arbeiten. Es werden entweder völlig einheitliche Oberflächen geschaffen oder, falls dies nicht in jedem Fall möglich ist, zumindest einheitliche Austauschformate zwischen unterschiedlichen Datenbanken implementiert. Im Rahmen bereits stattfindender gemeinsamer Arbeitsgruppenbesprechungen (unter Einbeziehung zweier weiterer Arbeitsgruppen der MLU) wird u.a. über gegenseitig adaptierbare eigene Algorithmen- und Methodenentwicklungen diskutiert.

In den kommenden Jahren sollen diese Kompetenzen insbesondere mit der Entwicklung neuer Methoden der Chemoinformatik wesentlich ausgebaut werden. So sollen im Rahmen von Kooperationen (gemeinsame EU-Projekte eingereicht) mit Instituten und regionalen Firmen neue Methoden

- zur schnellen Ähnlichkeits- und Substruktursuche,
- zur Analyse von Struktur-Wirkungsbeziehungen,
- zur schnellen automatischen Analyse und Korrelation von (auch unvollständigen) Spektren und Chromatogrammen und
- zu Ontologien im Bereich von Strukturen und Eigenschaften kleiner Moleküle (ontologische Chemie) entwickelt werden.

In einem weiteren Kooperationsprojekt sollen Datenbanken mit Milliarden von Computer-generierten Verbindungen als Basis für *in silico* screening erstellt werden.

Ergänzt wird der Pool der Datenbanken durch den weiteren Ausbau einer Naturstoffdatenbank mit integrierten medizinischen und biologischen Informationen (Phytobase) und eine Datenbank für die am IPB synthetisierten oder isolierten Verbindungen.

Neben dem bereits effektiv abteilungsübergreifend genutzten Datenbanksystem zur Chemikalienverwaltung (CLAKS) soll eine eigene Datenbankoberfläche zu allen kleinen Molekülen des IPB geschaffen werden, die über das Intranet einen Zugriff auf die Daten (einschließlich spektroskopischer Daten auf Metaebene) durch alle Mitarbeiter des Institutes erlaubt. Zur öffentlichen Verfügbarmachung der Daten sowie zur externen Datenerhebung wird eine kostenneutrale Lösung mit einem externen Partner angestrebt (Beilstein Inst., Wiley-VCH u.ä.).

Langfristig soll schließlich mit der Entwicklung einer neuen Generation von Kraftfeldern zur schnellen Berechnung von thermodynamischen und kinetischen Größen (Reaktionsenthalpien, Aktivierungsenthalpien) für Proteinkatalysemechanismen und/oder organischer Chemie und später auch für neue Methoden der Sekundär- und Tertiärstrukturvorhersage von Proteinen ein umfassendes System für Applikationen der Computerchemie geschaffen werden, welches internationalem Stand entspricht bzw. diesen mitbestimmt.

Die Entwicklung von Bioinformatik-Anwendungen wird einerseits durch konkrete Benutzeranforderungen getrieben, andererseits durch die mittel- und langfristige Zielsetzung, eine umfassende Metabolomanalyse anzubieten. Dabei werden Methoden erst algorithmisch implementiert, und später, wenn eine regelmäßige Nutzung absehbar ist, als Web-Applika-

tion adaptiert. Hierzu wurde bereits eine passende Infrastruktur und Bibliothek geschaffen, die die Kopplung der Algorithmen an Web Browser wesentlich erleichtert.

Die langfristigen Projekte der Arbeitsgruppe sind:

- Integration von Metabolomics-, Proteomics- und Transcriptomics- Daten,
- Kopplung der Metabolomdaten an Struktur-, Stoff- und Eigenschaftsdatenbanken,
- reichhaltige Annotation von Metaboliten, ähnlich der Gene Ontology,
- Generierung von Hypothesen für metabolische Netzwerke aus den Messdaten.

Die Entwicklung und der Betrieb dieser Projekte wird langfristig mit der Weiterentwicklung bzw. Etablierung der folgenden Datenbanken bzw. Plattformen unterstützt:

- **Substanzdatenbanken**
  Am Institut werden zur Zeit mehrere 2D-Struktur- und Substanzdatenbanken auf der Basis der proprietären DBMS ChemFinder bzw. SciDex/CLAKS[1] geführt. Die Systeme dienen der Erfassung der am Institut synthetisierten bzw. isolierten Substanzen und der Verwaltung von Chemikaliengebinden, insbesondere auch im Hinblick auf die Gefahrstoffverordnung. Perspektivisch wird momentan die Zusammenführung dieser Datenbanken diskutiert.

- **3D-Strukturdatenbank**
  Auf der Grundlage von 2D-Strukturen (eigene Substanzdatenbanken und kommerzielle Kataloge) chemischer Verbindungen werden ständig 3D-Konformationen berechnet und in entsprechenden Datenbanken gespeichert. Diese 3D-Datenbanken werden zum *in silico* screening und zur Pharmakophor- und Ähnlichkeitssuche verwendet.

- **2D-NMR-Datenbanksystem**
  In Zusammenarbeit mit dem Institut für Informatik der Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg wird eine Software für Extraktion, Speicherung und Analyse von relevanten Daten aus experimentellen und berechneten 2D-NMR-Spektren entwickelt.
  Diese Datenbank sollte über geeignete Schnittstellen mit den geplanten Substanz-, Proteomics- und Metabolomics-Datenbanken verknüpft werden. Ziel der Entwicklung dieser Inhouse-Datenbank(en) ist es, den Informationsaustausch zwischen den Wissenschaftlern deutlich zu vereinfachen.

- **Metabolomics Plattform**
  Für die Speicherung der Metabolomics Daten werden XML-Standards umgesetzt, die momentan in der wissenschaftlichen Community erarbeitet werden. Die Auswertung wird primär innerhalb der freien Statistiksoftware R / Bioconductor implementiert.

- **Proteomics Plattform**
  Analog zur Metabolomics Plattform wird eine Proteomics Lösung eingesetzt. Diese baut auf denselben bzw. kompatiblen Standards auf, und erlaubt daher die kombinierte Analyse von Proteomics- und Metabolomics Daten.

---

[1] CLAKS steht dabei für **C**hemikalien **La**ger- und **K**atasters**s**ystem.

- **Experiment-MetaDaten**
  Die Ergebnisse von biochemischen und statistischen Analysen lassen sich nur mit einer reichen Annotation der Metadaten (Genotyp, Wachstum, Behandlung, Sample-Vorbereitung etc.) interpretieren und reproduzieren. Diese Daten werden für eine wachsende Zahl von Projekten kompatibel zu internationalen Standards (MIAME, MIAPE und MIAMET) in Datenbanken abgelegt.

2.2.2. Ressourcenplanung

Die Ressourcen der Arbeitsgruppen Computerchemie und Bioinformatik lassen sich in Personalressourcen und im weitesten Sinn technische Ressource (Software, Hardware) unterteilen. An Personalressourcen stehen den beiden Gruppen zusammengenommen nur Stellen für die Gruppenleiter und die technischen Systemadministratoren zur Verfügung. Der größte Teil der wissenschaftlichen Arbeit wird von Praktikanten, Diplomanden, Doktoranden und Postdoktoranden geleistet. Die dafür notwendigen Personalmittel werden von den jeweiligen Gruppen über – ggf. gemeinsame – Projekte eingeworben. Dringend notwendig ist die Schaffung einer Position für einen wissenschaftlichen Systemadministrator, welcher nicht nur in der Lage ist, technische Probleme zu lösen sondern auch eigene Programme- und Scripte für wissenschaftliche Aufgabenstellungen einschließlich dem Datenbankmanagement (zurzeit u.a. Claks) zu entwickeln.

Zur Absicherung der Leistungsfähigkeit der Arbeitsgruppen ist die kontinuierliche Anschaffung oder Weiterlizenzierung international anerkannter Standardsoftware unumgänglich. Neben den bereits vorhandenen Programmen ist es langfristig geplant, ein integriertes Labordatensystem zu erwerben bzw. zu entwickeln. Dieses sollte dann so beschaffen sein oder entsprechend adaptiert werden, dass mittels möglichst einfacher Schnittstellen eine Kommunikation mit anderen Datenbanksystemen (z.B. Struktur- und Spektroskopiedatenbanken) möglich ist.

Bedingt durch die zeitlich versetzte Gründung und die zurzeit noch bestehende räumliche Trennung der Arbeitsgruppen ist die Computertechnik der beiden Gruppen nur lose über die allgemeine Infrastruktur des Instituts verbunden. Mit dem Umzug der Bioinformatikgruppe in die zurzeit im Bau befindlichen Gebäude auf dem Institutsgelände wird eine stärkere Verzahnung zwischen den Gruppen möglich. Es wird erwartet, dass hierdurch große Synergieeffekte erzielt werden können. Geplant ist die Zusammenführung der Batch-Systeme zu einem einheitlichen Cluster, dessen Knoten durch Load-Balancing bzw. Queuing-Systeme in ihrer Auslastung optimiert werden sollen. Mittelfristig ist der schrittweise Aufbau eines Clusters mit bis zu 64 Knoten geplant, wobei die Konfiguration einiger weniger Knoten ggf. dediziert an spezielle Aufgaben angepasst sein wird. Damit sind vor allem Knoten zur Ausführung massiv paralleler Programme (acht oder 16 Kerne pro Knoten) oder ein Knoten mit großem, direkt angeschlossenen Speichersubsystem zum Datenbankmanagement gemeint. Im Übrigen wird aber die engere Anknüpfung an zentrale Ressourcen (SAN, LDAP usw.) und die (zumindest logische) Zentralisierung der bislang lokalen Massenspeicher angestrebt. Es muss sichergestellt sein, dass die Netzwerkinfrastruktur den zu erwartenden Datenströmen gewachsen ist. Durch geeignete Wahl des Aufstellungsortes für die SAN-Hardware ist jedoch eine gewisse Optimierung möglich. Darüber hinaus wird am Institut – insbesondere für Spitzenlasten – immer auch die Nutzung von Kapazitäten externer Computersysteme (Rechenzentrum der MLU, IPK Gatersleben usw.) erwogen, jedoch sind die Möglichkeiten hierzu

aufgrund von Lizenzbedingungen oder Geheimhaltungsfragen beschränkt. Dasselbe gilt für Kooperationen mit Firmen auf diesem Gebiet.

Die geplante Erweiterung der technischen Ressourcen zum Backup und zur langfristigen Archivierung wird im technischen Teil diskutiert.

2.2.3. Softwareentwicklung

Mit der zunehmenden Informatik-Kompetenz im IPB werden in Zukunft mehr und umfangreichere Software-Eigenentwicklungen entstehen als bisher.

2.2.3.1. Richtlinien

Für Projekte, bei denen für die Entwickler am IPB die Wahlfreiheit der Entwicklungsumgebung besteht, wird eine einheitliche Plattform empfohlen, um die Interoperabilität und Zukunftssicherheit der Entwicklungen zu sichern. Für nicht Performanz-kritische Anwendungen wird Java mit Eclipse als Entwicklungsumgebung für eine modulare Entwicklung mit Methoden des modernen Software Engeneering eingesetzt. Die Entwicklungen werden nach Möglichkeit als Web-Applikationen realisiert, damit sie sowohl im Intranet, als auch extern bereitgestellt werden können. Die enge Zusammenarbeit zwischen den beteiligten Abteilungen fördert den Wissenstransfer beim Einsatz dieser Werkzeuge.

Für das Molecular Modelling bleiben hochoptimierte Programme in C und Fortran erste Wahl. Hier kann durch zusätzliche Verbindungen wie etwa SOAP Services die Interoperabilität zu anderen Anwendungen hergestellt werden.

2.2.3.2. Verwertung und Lizenzierung

Wie bei den allgemeinen wissenschaftlichen Erkenntnissen setzt das IPB auch bei eigenen Softwareentwicklungen auf ein duales Verwertungskonzept. So wie wissenschaftliche Ergebnisse entweder in wissenschaftlichen Journalen publiziert oder zum Patent angemeldet werden, ist bei Software die Weitergabe unter einer freien oder einer geschlossenen Lizenz möglich. Die freie Lizenz (z.B. GPL) stellt dabei sicher, dass Weiterentwicklungen außerhalb des Instituts ebenfalls an die Community zurückfließen. Dagegen wird mit einer geschlossenen Lizenz den Lizenznehmern ermöglicht, gegen eine entsprechende Lizenzgebühr eigene Weiterentwicklungen selbständig zu vermarkten. Bei der Formulierung der Lizenzbedingungen müssen selbstverständlich die rechtlichen Zwänge (u.a. Stiftungsrecht, Institutssatzung usw.) berücksichtigt werden.

2.3. Bibliothek

Die Hauptaufgabe der Bibliothek ist die Literatur- und Informationsversorgung der Wissenschaftler des IPB. Die Bibliothek hat damit eine zentrale Rolle bei der Schaffung von Voraussetzungen für das erfolgreiche wissenschaftliche Arbeiten. Neben den traditionellen Printmedien (Journale, Monografien, Lehrbücher) nehmen virtuelle Informationsquellen (Online-Journale, Datenbanken, Online-Recherche) an Bedeutung zu. Die Bibliothek ist daher finanziell wie technisch so auszustatten, dass sie der Aufgabe der Informationsbeschaffung in der immer stärker digitalisierten Informationslandschaft gewachsen ist.

Zeitschriften und Zeitschriftenreihen der IPB-Bibliothek sind vollständig, Monografien bisher zu ca. 90% im OPAC-Online-Katalog verzeichnet. Über das Internet hat jeder Wissenschaftler Zugang zum OPAC-Katalog. Die zurzeit noch karteikartenbasierte Ausleihverbuchung soll noch 2006 auf ein elektronisches Verfahren umgestellt werden.

Der derzeitige Zugang zu elektronischen Zeitschriften ist nicht ausreichend und bedarf sowohl kurz- als auch mittelfristig einer deutlichen Verbesserung. Auch der Bestand an elektronischen Datenbanken und der Zugang zu online verfügbaren Recherchediensten und Datenbanken muss regelmäßig erweitert werden. Hier ist ein wesentlicher Handlungsbedarf gegeben, zumal die Nutzung von Printmedien im Zeitschriftenbereich zugunsten elektronischer Zugänge schnell abnehmen wird.

Ähnlich wie im Bereich elektronischer Zeitschriften bestehen auch beim Datenbankzugang starke Defizite, z.B. Beilstein und Crossfire. Scifinder ist nur über teure Einzelabfragen zugänglich. Alle Versuche, durch Vereinbarungen mit der Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg Online-Zugriffe auf diese Datenbanken zu erhalten, sind bisher gescheitert.

In der Bibliothek befinden sich mehrere Computerarbeitsplätze. Es ist dafür zu sorgen, dass diese Arbeitsplätze hinsichtlich Hard- und Software auf dem aktuellen Stand bleiben. Zu diesem Zweck sollten jährlich in Zusammenarbeit der Arbeitsgruppen Bibliothek und EDV Bestands- und Bedarfsanalysen erfolgen und ggf. entsprechende Beschaffungsanträge eingereicht werden. Auch die Ausstattung der Arbeitsplatz-PCs (APCs) der Bibliotheksmitarbeiter ist regelmäßig den steigenden Anforderungen anzupassen.

Die Möglichkeiten des Intranets sollen verstärkt für eine nutzerfreundliche Bibliothek genutzt werden. Über das Intranet sollen – soweit urheberrechtlich keine Beschränkungen bestehen – die von den Wissenschaftlern des IPB veröffentlichen Zeitschriftenartikel, Diplom-, Promotions- und Habilitationsarbeiten elektronisch allen IPB-Mitarbeitern zur Verfügung gestellt werden. Eine Liste der in der Bibliothek (seit 2000) vorhandenen, neu eingegangenen und bestellten Monografien und Lehrbücher sollte ebenfalls über das Intranet zugänglich sein.

3. Technisches Konzept

In den folgenden Abschnitten werden die Netzwerkdienste, Geräte- und Softwareausstattungen sowie die Datensicherheit und –archivierung dargestellt.

3.1. Netzwerkdienste (Internet)

Das Internet als Oberbegriff von Netzwerkstruktur und Anwendungsprotokollen ist zu einer nahezu universalen Quelle von Wissen geworden und bietet in Form von dynamischen Inhalten und zahlreichen Kommunikationskanälen unzählige, über die reine Informationsverbreitung hinausgehende Möglichkeiten.

3.1.1. World Wide Web

Noch vor Email dürfte das World Wide Web der Hauptmotor bei der raschen Verbreitung des Internets Ende der neunziger Jahre gewesen sein. Die Erfindung des World Wide Web am CERN in Genf hat wie kaum eine andere Erfindung die Entwicklung und Wahrnehmung von Computern und Netzwerken beeinflusst. Praktisch keine ernstzunehmende Institution kann

es sich heute leisten, auf eine Präsenz im World Wide Web zu verzichten. Bis 2004 war das IPB im Internet mit überwiegend statischen Seiten vertreten, für deren Pflege die Pressestelle verantwortlich zeichnete. Im Laufe der Jahre hatte die Internet-Präsenz jedoch einen Umfang erreicht, bei dem die Pflege von Inhalt und Design der statischen Seiten nicht mehr effizient durch die Pressestelle zu leisten war.

Nach einigen Versuchen kurzfristig wirksame Verbesserungen zu erzielen, wurden zunächst kleinere Insellösungen wie eine Web-Datenbank für Kontaktadressen (MySQL und PHP) und verschiedene Kalenderapplikationen zur Administration der effizienten Auslastung wissenschaftlicher Großgeräte für das Intranet geschaffen. In Diskussionsrunden zum IT-Konzept wurde jedoch sehr schnell herausgearbeitet, dass als langfristige Lösung nur eine umfassende Dynamisierung mittels eines Content Management Systems (CMS), sowie eine klare Trennung von Internet und Intranet in Frage kommen. Als positiver Nebeneffekt wurde die Möglichkeit gesehen, einzelne Mitarbeiter zu befähigen, Inhalte selbst zu erstellen und hochaktuell online verfügbar zu machen.

Die Entscheidung fiel schließlich auf das unter GPL verfügbare CMS „TYPO 3“, welches seit Anfang 2005 im IPB im Einsatz ist. Die erste Implementierung erfolgte in Zusammenarbeit von Pressestelle und der Arbeitsgruppe Gerätetechnik und EDV, fachlich beraten durch die EDV-Kommission und unterstützt durch studentische Hilfskräfte. Als technische Ressource wird ein PC mit 1 GHz PentiumIII Prozessor unter dem Betriebssystem Linux verwendet (klassische LAMP-Installation).

Im Life-Betrieb zeigte die Website aber noch deutliche Schwächen bei praktisch allen Kriterien, die einen modernen professionellen Webauftritt ausmachen (usability, content, visuelle Umsetzung, joy of use). Seit Mai 2005 steht dem IPB deshalb ein spezialisierter Mitarbeiter zur Verfügung, der sich mit der konsequenten Abstellung der genannten Mängel beschäftigt. Im Zuge dieser Arbeiten entstand auch eine Typo 3-Extension zur webgerechten Darstellung der im IPB erstellten wissenschaftlichen Publikationen. Als perspektivische Aufgaben werden Barrierefreiheit, medienneutrale Datenhaltung, Suchmaschinenfreundlichkeit und Auswertung der Besucherstatistiken als wichtige Meilensteine für die weitere Verbesserung des IPB-Webauftritts angesehen.

3.1.2. FTP

Das File Transfer Protocol FTP ist aufgrund seiner konzeptuellen Einfachheit und breiten Unterstützung das Mittel der Wahl zur Distribution und zum Austausch von Dateien. Trotz inhärenter Sicherheitsmängel findet derzeit allenfalls eine schleichende Ablösung dieses Standards durch andere Protokolle (z.B. SecureFTP) statt. Um trotzdem Datensicherheit und Datenschutz zu gewährleisten, kann der FTP-Server des IPB von Mitarbeiten und Außenstehenden nur auf Antrag genutzt werden. Der Server mit 450 MHz Pentium II Prozessor unter dem Betriebssystem Windows NT Server ist so konfiguriert und wird so betrieben, dass das öffentliche /pub-Verzeichnis möglichst wenige Daten enthält. Das Verzeichnis ist schreibgeschützt und das Einstellen von Daten kann nur erfolgen, wenn die Daten keiner Geheimhaltung unterliegen und ein entsprechender Antrag gestellt wurde. Nach erfolgtem Download werden die Daten im /pub-Verzeichnis zur Sicherheit umgehend wieder gelöscht. Daten, die nicht für die Öffentlichkeit bestimmt sind, werden in Benutzerverzeichnissen abgelegt, auf die nur nach erfolgreicher Authentifizierung zugegriffen werden kann. Die Verzeichnisse werden mit den größtmöglichen Zugriffsbeschränkungen eingerichtet, um Missbrauch zu erschwe-

ren. Zudem werden Daten, Verzeichnisse und Kennzeichen gelöscht, sobald der Grund für ihr Fortbestehen entfällt. Der Upload von Daten kann über das /upload-Verzeichnis erfolgen, das zur Erschwerung von Missbrauch und Datenspionage unsichtbar und nur schreibbar konfiguriert ist. Eine Verwendung oder Manipulation der Daten ist nur nach Sichtung und Bereitstellung durch den Administrator möglich.

Zur Distribution der aktuellen Virensignaturen wurde außerdem ein verstecktes Verzeichnis /update eingerichtet, auf das anonym aber nur lesend zugegriffen werden kann. Die Rechner im Institut aktualisieren auf diesem Weg regelmäßig ihre Antivirus-Software. Um Unregelmäßigkeiten erkennen zu können, werden außerdem alle Zugriffe auf den FTP-Server protokolliert.

3.1.3. Email

Der Email-Verkehr am IPB wird über einen Microsoft Exchange 2000 Server abgewickelt, der neben Email auch Kalender, Terminverwaltung, Kontaktdatenbank usw. zur Verfügung stellt. Daneben fungiert der Server ipb-exchange.ipb-sub.ipb-halle.de als primärer Domaincontroller für die Domäne MAIL-IPB-HALLE. Zur Gewährleistung einer möglichst hohen Daten- und Betriebssicherheit werden regelmäßig Patches eingespielt. Außerdem ist der Server so eingerichtet, dass Emails nur aus dem internen Netz oder vom Mail-Gateway der MLU entgegen genommen werden können. Der Zugriff *via* POP3, IMAP bzw. über das Exchange-Protokoll kann ebenfalls nur aus dem internen Netz erfolgen. Für den Zugriff auf Mails aus dem Internet wurde die Möglichkeit des „OutLook Webaccess" geschaffen. Der Datentransfer von und zu dieser Webanwendung erfolgt mit einer 128bit-Verschlüsselung über das https-Protokoll. Zur Abwehr von Viren werden alle Emails auf Viren gescannt und die Verbreitung von Attachments mit bestimmten Dateierweiterungen (.pif, .exe, .com, .scr, .bat usw.) wird generell unterbunden.

3.1.4. Datenbankdienste und Webservices

Das IPB betreibt zur Zeit keine eigenen, über das Internet erreichbaren Datenbankservices. Die Bedeutung dieser im Internet angebotenen Dienste für die Wissenschaft ist jedoch so enorm (Genom-, Proteom- und Metabolomdatenbanken; Literaturdatenbanken wie "Web of Science" und "CAS"; Spektren), dass sie an dieser Stelle kurz erwähnt werden sollten. Die umfassende Information der Mitarbeiter über existierende Anwendungen und neue Entwicklungen und die Einrichtung von "Schnellzugängen" werden ein Kernelement des noch zu schaffenden Intraweb-Dienstes (s. dort) sein.

3.2. Netzwerkdienste (Intranet)

Als Intranet werden die Dienste, Web- und Applikations-Server bezeichnet, die nur für die Mitarbeiter des IPB zugänglich sind. Gründe für die Beschränkung sind dabei die Vertraulichkeit der Daten, oder Ressourcenbeschränkungen, die eine Nutzung durch eine hohe Zahl von Nutzern ausschließen. Die Zugriffskontrolle geschieht durch physikalische Zuordnung der Arbeitsplätze, durch die Netzwerk Infrastruktur des Institutes oder eine VPN Lösung, die auch externen Rechnern einen verschlüsselten Zugang zu den internen Ressourcen erlaubt. Damit können IPB Mitarbeiter, die sich z.B. auf Konferenzen oder vorübergehenden Gastaufenthalten befinden, über eine sichere Verbindung auf die geschützten Ressourcen zugreifen

3.2.1. Interner Datenaustausch

Effektives wissenschaftliches Arbeiten hat zunehmend einen schnellen und umfassenden elektronischen Informationsaustausch zwischen den Wissenschaftlern zur Voraussetzung. Um dies abteilungsübergreifend am IPB zu gewährleisten, werden folgende informationstechnische Werkzeuge geschaffen bzw. verbessert:

- System von Netzlaufwerken (mit differenzierten Zugriffsrechten) zum schnellen (!) Informationsaustausch zwischen einzelnen Wissenschaftlern, Arbeitsgruppen und Abteilungen,
- Ausbau des Intranets,
- Abteilungsübergreifende Datenbanken (siehe 2.).

3.2.1.1. Printserver

Aus Effizienzgründen werden die Arbeitsplatz-PCs in der Regel nicht mit einem eigenen Drucker ausgestattet. Statt dessen werden in der Anschaffung etwas teurere aber im Unterhalt günstigere Abteilungsdrucker aufgestellt, auf die über das Netzwerk von allen Rechnern zugegriffen werden kann. Die Printserver-Funktionalität für einen Teil dieser Drucker wird von den Novell-Fileservern übernommen.

3.2.1.2. Intraweb

Die Existenz einer Forschungseinrichtung ohne Auftritt im World Wide Web ist heutzutage unvorstellbar. Die dahinter stehende Technologie und die mit ihr verbundenen Möglichkeiten sind jedoch auch für die nichtöffentliche Verwendung interessant. Der Webserver des IPB stellt daher im Intranet zusätzlich zum öffentlich abrufbaren Inhalt weitere Informationen zur Verfügung. Gegenwärtig handelt es sich um Informationen für neue Mitarbeiter und Gäste, Informationen zu Sicherheitskonzepten, wichtige Formulare, Nutzungslisten für wissenschaftliche Großgeräte und eine aus der Kontaktdatenbank generierte (druckbare) PDF-Telefonliste. Aus Sicherheitsgründen (hier spielen u.a. auch rechtliche Aspekte eine Rolle) und wegen der leichteren Administrierbarkeit ist für die nähere Zukunft die Einrichtung eines separaten WWW/CMS-Servers für das Intranet geplant. Da am Institut bereits Know-how aus dem Internetprojekt vorhanden ist, soll der Intraweb-Service mit dem System TYPO3 realisiert werden. Durch die Aufstellung klarer Regeln für die Veröffentlichung, gründliche Dokumentation relevanter Details und Schulungen soll ausgewählten Mitarbeitern die Möglichkeit zur Mitgestaltung der Intraweb-Inhalte gegeben werden, da dies den effizientesten Weg zu Relevanz und Aktualität der Inhalte darstellt. Insbesondere wird hier auch über die Einrichtung eines Wikis nachgedacht, da diese Technologie eine schnelle Erstellung und eine besonders effektive Vernetzung von Inhalten erlaubt. Das Intraweb soll zukünftig als zentrale Informationsquelle dienen und darüber hinaus den zentralen Zugang zu (den am Institut entwickelten) Web-Applikationen darstellen.

3.2.2. Firewall, HTTP-Proxy

Computerforensische Analysen von Sabotageakten haben in der Vergangenheit ergeben, dass die meisten Angriffe auf Computersysteme von innerhalb verübt wurden. Mit der zunehmenden Vernetzung ist die Bedrohung von außen in den letzten Jahren jedoch massiv

gewachsen, wobei die Angriffe überwiegend nicht konkret gegen das Institut, sondern allgemein gegen alle Nutzer des Internets gerichtet sind. Durch die Einrichtung einer Firewall und die zwangsweise Filterung des HTTP-Verkehrs werden bestimmte Angriffsarten wirksam unterbunden und weitere zumindest deutlich erschwert. Zudem wird durch den Proxy der Download unerwünschter oder illegaler Inhalte (Hetzschriften, Pornographie, unautorisierte Kopien von Audio- und Videomaterial usw.) erschwert. Bei fehlerhafter Filterung kann dieser auf Anforderung für die entsprechende URL abgeschaltet werden. Der Zugriff auf Internetdienste wird in Logdateien protokolliert und kontrolliert. Zum Einsatz kommen die „Mandrake Network Firewall" und der Webproxy „Squid", beide unter Linux. Wie erfolgreiche Angriffe auch auf namhafte Firmen beweisen, bietet auch eine Firewall-Lösung keinen hundertprozentigen Schutz. Aus diesem Grund ist auf dem Firewall-Rechner außerdem ein Intrusion Detection System (IDS) installiert, welches zwar Angriffe nicht verhindern kann aber durch Protokollierung der Aktivitäten Hinweise auf erfolgreiche Angriffe oder mögliche neue Einfallstore liefert. Damit dient diese Maßnahme vor allem der Schadensbegrenzung. Die Firewall führt außerdem Native Adress Translation (NAT) durch und erlaubt daher die Nutzung einer einzigen öffentlichen IP-Adresse für alle Arbeitsplatz-PCs (APCs). Neben der Schonung des sehr kleinen IP-Adresspools des Instituts sind die APCs dadurch auch vor direkten Angriffen aus dem Netz geschützt.

3.2.3. DHCP, DNS, LDAP

Zur Verwaltung von IP-Adressräumen, Rechnern und Nutzeraccounts werden am Institut die Dienste DHCP, DNS und ActiveDirectory von Microsoft und der Novell Directory Service eingesetzt. Die entsprechenden Dienste sind auf den Servern ipb1 bis ibp4 und auf dem Exchange-Server ipb-exchange lokalisiert. Lediglich in Ausnahmefällen (z. B. für Meßgerätерechner und Unix-Workstations) erfolgt die Vergabe statischer Adressen bzw. die Verwaltung von Accounts außerhalb von AD/NDS. Aus Sicherheitsgründen muss das Passwort für den Zugriff auf die Fileserver alle 80 Tage geändert werden. Die Nutzer und Computer der Abteilung Natur- und Wirkstoffchemie sind außerdem in Windows-Domänen (IPB-SUB und MAIL-IPB-HALLE) organisiert. Dadurch ist zum einen ein feiner granuliertes zentrales Rechtemanagement möglich und zum anderen die stringentere Personalisierung der Arbeitsumgebung durch die Verwaltung von Nutzerprofilen.

In der Arbeitsgruppe Computerchemie ist aus historischen Gründen noch das Network Information System (NIS) in Betrieb, dessen Ablösung durch LDAP/NDS längerfristig geplant ist.

3.2.4. Datenbanksysteme

Datenbanken sind das Mittel der Wahl zur strukturierten Datenaufbewahrung und bilden die Grundlage für die automatische Informationsverarbeitung (Data Mining etc.). Die Vielfalt bei Datenbanken und Datenbankmanagementsystemen (DBMS) ist praktisch unüberschaubar und bei nahezu allen Datenbanken wird die Wahl des DBMS vom Urheber der Datenbank getroffen. Das IPB hat daher in der Regel nur bei Eigenentwicklungen Einfluss auf die Wahl des DBMS. Zur Maximierung des Nutzens der Eigenentwicklungen sind die Entwicklergruppen am IPB bestrebt, Interoperabilität zwischen ihren Projekten und - soweit möglich - Fremdprodukten herzustellen (s.a. Abschnitt Software). Neben den rein technischen Aspekten müssen natürlich auch die (urheber-)rechtlichen Bestimmungen beachtet werden. Im

Folgenden soll ein kurzer Überblick über die wichtigsten am IPB in Benutzung befindlichen Datenbanken bzw. Datenbanksysteme gegeben werden:

Oracle ist zurzeit eines der funktionsmächtigsten verfügbaren DBMS. Viele Drittanbieter bauen (z.B. ACD/Labs) mit ihren Lösungen auf dieses DBMS auf. Das Institut betreibt für diese Zwecke eine Installation von Oracle in der Variante „*Standard Edition One*" auf einem Server mit 2 CPUs (Applikationsserver ipb4.ipb-halle.de).

Die beiden freien Datenbanken PostgreSQL und MySQL werden aufgrund ihrer einfachen Administrierbarkeit von vielen Entwicklern gerne verwendet. Auch die Eigenentwicklungen am IPB sollen primär auf diese Plattformen ausgerichtet werden. Am Institut werden bereits mehrere Instanzen von PostgreSQL bzw. MySQL betrieben, z. B. für die 2D-NMR-Spektrendatenbank, die Metabolomics Plattform, das TYPO3 Content Management System und diverse weitere Webapplikationen.

Der MS-SQL-Server wird als Datenbank-Backend für die betriebswirtschaftliche Software Navision Financials eingesetzt.

3.2.5. Fileservices (Novell, Windows, NFS)

Am IPB wird momentan vorrangig Novell Netware als Serverbetriebssystem für Fileserver eingesetzt, da sich die Betriebssysteme von Novell bei sauberer Konfiguration durch stabileren und ressourcenschonenderen Betrieb sowie einfachere Benutzer- und Rechteverwaltung auszeichnen. Für ihre speziellen Anforderungen setzen die Arbeitsgruppen Bioinformatik und Computerchemie Unix- bzw. Linux-Fileserver ein, auf die über NFS bzw. CIFS zugegriffen werden kann. Daneben wird – hauptsächlich für die Abteilung Natur- und Wirkstoffchemie – ein NAS-Server mit Microsoft Windows 2000 betrieben. Im Hinblick auf die Überarbeitung des Backup- und Archivierungskonzepts ist geplant, die bisherige Landschaft mit mehreren Fileservern in Richtung SAN weiterzuentwickeln.

3.2.5.1. Wissenschaftliche Abteilungen

Für die wissenschaftlichen Abteilungen werden die Nutzerdaten von zwei Novell-Servern (ipb1.ipb-halle.de und ipb2.ipb-halle.de) verwaltet. Bei den Servern handelt es sich um einen 3 GHzDual Xeon Server mit 180 GByte Plattenkapazität (ipb1) und einen HP-Server mit 930 MHz PentiumIII CPU und 164 GByte Plattenspeicher (ipb2), die beide unter der Open Enterprise Edition von Novell Netware 6.5 betrieben werden. Auf dem Server ipb1 sind hauptsächlich die Home-Verzeichnisse der Nutzer abgelegt, während der Server ipb2 als Software- (ACD, Reference Manager usw.) und Datenaustausch-Server fungiert.

Für den Datenaustausch mit Unix-Umgebungen wurde in der Vergangenheit ein Compaq-NAS-Server (Network Attached Storage) mit Dual Xeon CPU und 250 GByte Plattenkapazität beschafft. Aufgrund von Umstrukturierungen dient der Server heute hauptsächlich der Speicherung von Nutzerprofilen der in der Windows-Domäne registrierten Benutzer, der Speicherung von Nutzerdaten und der Abwicklung des Backups der Linux / Unix-Systeme. Die ursprüngliche Aufgabe des Transfers von Daten von Unix nach Windows wird momentan von einer Linux / Samba-Lösung erledigt. Der entsprechende Linux-Server (brandt12.ipb-nmr.ipb-halle.de; 2,2 GHz Xeon CPU; 2,4 TByte installierte Kapazität) dient auch der Arbeitsgruppe Computerchemie als Fileserver für die Unix-Workstations und den Compute-

Cluster. Im Rahmen der Konsolidierung der Storage-Landschaft wird die komplette Struktur und Aufgabenverteilung zwischen den einzelnen Servern zur Disposition zu stellen sein. Der Systemadministration fällt dabei die Aufgabe zu, die Migration reibungslos und möglichst wirtschaftlich zu gestalten.

3.2.5.2. Verwaltung

Aus Sicherheitsgründen handelt es sich beim Fileserver für die Verwaltung um einen separaten Rechner. Der Compaq-Server (server1.ipb-halle.de) mit 350 MHz PentiumII CPU wird unter Novell Netware 4.11 betrieben.

3.3. Präsentationsmöglichkeiten

Effektive wissenschaftliche Arbeit ist ohne häufigen und intensiven Austausch von Ideen untereinander nicht vorstellbar. Dieser Austausch findet in Form von Meetings und Seminaren statt, bei denen jeweils einzelne Wissenschaftler ihre Ergebnisse, Ideen oder Fragestellungen präsentieren. Die zeitgemäße Form stellt dabei nicht mehr die Projektion von Dias oder Overheadfolien dar, sondern die direkte Visualisierung einer Präsentation mittels Videobeamer. Im Kurt-Mothes-Saal und in den Seminarräumen wurden aus diesem Grund Videobeamer fest installiert. Für besondere Veranstaltungen („Lange Nacht der Wissenschaften" usw.) existieren auch noch zwei mobile Beamer in den Abteilungen Natur- und Wirkstoffchemie und Sekundärstoffwechsel.

3.4. Beschaffung und Entsorgung von Hard- und Software

Die kaufmännisch/administrative Vorgehensweise bei der Beschaffung eines jeglichen Gerätes, die Verfahren zur Ausschreibung, Inventarisierung, Abschreibung, Reparatur, Aussonderung und Verschrottung sind weitgehend rechtlich vorgegeben und werden im Institut ordnungsgemäß durch interne Verfahrensregelungen umgesetzt. Grundlage für jede diesbezügliche Entscheidung sind klare Regeln. Insbesondere bei der Beschaffung ist planmäßig vorzugehen.

3.4.1. Beschaffung

Die Entscheidung über die Beschaffung von Hard- und Software sowohl für das dezentrale als auch zentrale Equipment des Hauses liegt in den Händen der beiden technischen Administratoren. Alle Anträge aus den Abteilungen und Arbeitsgruppen werden von ihnen auf Notwendigkeit, Kompatibilität und Wirtschaftlichkeit geprüft.

Die Ausstattung des Hauses mit Hard- und Software wird ausschließlich bedarfsorientiert vorgenommen. Für die Ausstattung mit Standard-PC, die den überwiegenden Teil der Anforderungen ausmachen, gelten die Beschaffungsgrundsätze des IPB. Die Bestellanforderungen für APCs, die über die Standardausstattung hinausgehen, müssen eine Spezifikation der Leistungsfähigkeit und des Einsatzzweckes aufweisen, die schriftlich fixiert ist. Angestrebt wird eine jährlich einmalige Beschaffungsaktion, da dann wegen des großen Auftragsvolumens von den Anbietern die günstigeren Konditionen zu erwarten sind. Außerdem hat man es dann mit einer Serie praktisch identischer Hardware zu tun, was die Installation und Wartung deutlich vereinfacht. Dies lässt sich allerdings nicht komplett realisieren, da durchaus kurzfristig zu realisierende Anforderungen entstehen, z.B. durch Totalausfall von Hardware

oder kurzfristige Bewilligung von Drittmitteln. Die technischen Spezifikationen werden vom IT-Personal und der Ausschreibungstext vom zentralen Einkauf verfasst. Je nach Höhe der zu erwartenden Gesamtkosten wird über eine freihändige Vergabe, eine beschränkte oder eine öffentliche Ausschreibung entschieden. Die eingehenden Angebote werden bezüglich Vollständigkeit, Qualität und technischer Eignung sowie Fachkompetenz und Zuverlässigkeit der bietenden Firmen vom IT-Personal ausgewertet. Ein entsprechender Vergabevorschlag wird dem zentralen Einkauf übermittelt, der dann in Übereinstimmung mit den Regeln der Verdingungsordnung für Leistungen (VOL) endgültig über die Vergabe entscheidet. Oberstes Prinzip ist immer maximale Wirtschaftlichkeit unter Einhaltung der technisch notwendigen Spezifika.

Zusammenfassend gelten folgende Grundsätze für die Planung und Ausführung von IT-Vorhaben:

3.4.2. Richtlinien für die Planung von IT-Vorhaben

Als IT-Vorhaben sind alle geplanten wissenschaftlichen oder anderweitigen Vorhaben anzusehen, zu deren Ausführung auch der Einsatz von IT notwendig ist, insbesondere wenn diese angeschafft oder erweitert werden soll.

Vor der Ausführung von IT-Vorhaben sind der Komplexität und den Kosten des Verfahrens angemessene Planungsunterlagen zu erstellen. Die Planung hat grundsätzlich unter den Gesichtspunkten der Notwendigkeit und Wirtschaftlichkeit aller Komponenten zu erfolgen. Soweit es sich um Verfahren handelt, die von den Wissenschaftlern eingesetzt werden sollen, sind diese in Zusammenarbeit mit dem IT-Fachpersonal für die Planung zuständig. Handelt es sich um generelle Fragen, insbesondere um Wartung und Ausbau des Netzwerkes und den Einsatz von Standardhard- und Software, so ist das IT-Fachpersonal zuständig. Die Planungsunterlagen sollen folgende Punkte enthalten:

- Ziele des Vorhabens,
- finanzielle, organisatorische und personelle Auswirkungen einschließlich aller absehbaren Folgekosten und des zusätzlich entstehenden Wartungsaufwandes,
- Entwicklungs- und Programmieraufwand,
- Kompatibilität zu vorhandenen Verfahren und Datenbeständen,
- Absicherung der Finanzierung,
- geschätzter Zeitbedarf für die Realisierung,
- evtl. Bedarf an Mitarbeiterschulungen,
- evtl. notwendige Maßnahmen zu Datenschutz und Datensicherheit,
- Aussagen zur Wirtschaftlichkeit insbesondere im Vergleich zu vorhandenen Alternativen und
- die für die Umsetzung der Maßnahme verantwortlichen Mitarbeiter.

3.4.3. Richtlinien für die Ausführung von IT-Vorhaben

Die Ausführung von IT-Vorhaben darf erst beginnen, wenn ihre Planung abgeschlossen und insbesondere ihre Finanzierung vollständig abgesichert ist. Für die Beschaffung von Hard- und Software ist die zentrale Einkaufsabteilung in Zusammenarbeit mit den Mitarbeitern der Arbeitsgruppe Gerätetechnik/EDV zuständig. Dabei ist jährlich einmal ein je nach Umfang öffentliches oder beschränktes Ausschreibungsverfahren durchzuführen, das den gesamten Jahresbedarf abdeckt. Einzelbestellung und freihändige Vergabe sind nur in dringenden und begründeten Ausnahmefällen zulässig. Diese Regelungen gelten nicht für den Softwarekauf, da eine Reihe von Rahmenverträgen für bis zu 90 % billigere "Forschung- & Lehre Lizenzen" bestehen. Diese günstigen Bedingungen kann kein Anbieter unterbieten, zumal in der Regel auch kein Softwarehändler die gesamte Palette unseres Bedarfs abdecken kann. In den Fällen, wo die Rahmenverträge über das Land Sachsen-Anhalt oder über die WGL abgeschlossen wurden, können wir auch nicht den entsprechenden Händler wechseln.

Die Ausschreibungsunterlagen sollen die funktionalen Leistungsanforderungen enthalten und nur in Ausnahmefällen ein spezielles Fabrikat vorgeben. In Zusammenarbeit mit dem IT-Fachpersonal ist das wirtschaftlich günstigste Angebot auszuwählen. In die Wirtschaftlichkeitsbetrachtungen sind neben dem Preis auch die absehbaren Folgekosten, die Leistungsfähigkeit, Kompatibilität, Skalierbarkeit, Wartungs- und Bedienerfreundlichkeit, Zeit- Personal und Fremdpersonalbedarf sowie die Fachkompetenz, Leistungsfähigkeit und Zuverlässigkeit der anbietenden Firmen einzubeziehen. Soweit Entwicklungs- und Programmierungsarbeiten notwendig sind ist zu prüfen, ob diese durch eigenes IT-Personal durchgeführt werden kann.

3.4.4. Reparatur und Ersatz

Reparatur und Ersatz von defekter Hardware obliegen grundsätzlich dem IT-Fachpersonal. Wartungs- und Reparaturverträge werden also nicht abgeschlossen. Auch hier stehen wiederum Notwendigkeit und Wirtschaftlichkeit zentral im Vordergrund. Dazu werden die Gewährleistungs- bzw. Garantiefristen vollständig ausgeschöpft. Bei der Frage von Reparaturen sind natürlich neben den eigentlichen Kosten der aktuelle Buchwert und eine Prognose über die weitere Funktionsfähigkeit nach der Reparatur hinsichtlich der Dauer und der Anforderungen sowie die Kosten für eine Ersatzbeschaffung zu berücksichtigen. Der aktuelle Buchwert sowie Abschreibungs- Gewährleistungs- und Garantiefristen können jederzeit in der Buchhaltung bzw. in der Beschaffungsstelle erfragt werden, da eine eindeutige Zuordnung der Geräte über die Inventarnummer möglich ist. Ersatzbeschaffungen sind vor Ablauf der Abschreibungsfristen möglich, wenn ein Totalschaden vorliegt. Dies ist auch dann der Fall, wenn die Kosten für eine Reparatur den Buchwert überschreiten oder eine längerfristige Gebrauchsfähigkeit nach der Reparatur nicht erwartet werden kann. Unverhältnismäßig hohe Kosten fallen in der Regel bei Ersatzteilen für Drucker, insbesondere Tintenstrahldrucker an. Prinzipiell ist natürlich die Reparatur die bevorzugte Option, zumal ein großer Teil der Hardwarekomponenten durch den teilweise drastischen Preisverfall der letzten Jahre sehr preisgünstig beschafft werden kann. Die Ersatzteile werden, bis auf einzelne Verschleißteile wie z.B. Lüfter, nicht vorrätig gehalten. Im Bedarfsfalle werden sie je nach günstigstem Anbieter bei Internethändlern oder ortsansässigen Firmen bestellt. Die Lieferfristen sind zumindest bei den meisten Hardwarekomponenten recht kurz (einige Stunden bis ca. zwei Tage), sodass Beeinträchtigungen durch Ausfallzeiten recht gering gehalten werden können. Wenn möglich werden aber auch Ersatzteilbestellungen zunächst gesammelt, um Kosten für Verpackung und Versand zu minimieren.

3.4.5. Verschrottung

Die Entscheidung über die Verschrottung von Geräten aller Art inklusive der IT obliegt den Mitarbeitern der Arbeitsgruppe Gerätetechnik/EDV, soweit es sich nicht um veraltete wissenschaftliche Geräte handelt, die ihren Zweck wegen der Einführung neuer wissenschaftlicher Methoden nicht mehr erfüllen können. Ausgemustert werden defekte Geräte, die nicht mehr wirtschaftlich repariert werden können, oder die aufgrund ihrer technischen Parameter nicht mehr sinnvoll in irgendeinem Bereich des Institutes eingesetzt werden können. Sämtliche auszusondernden Geräte werden einer Prüfung der Funktionsfähigkeit der Einzelkomponenten unterzogen. Funktionsfähige Teile werden zum Zwecke der Reparatur und u.U. auch der Aufrüstung vorhandener Geräte ausgebaut und ggf. bis zu ihrer Verwendung eingelagert. Alle anderen Teile werden über eine Fachfirma für Elektronikschrott entsorgt. Besonderes Augenmerk wird natürlich den Datenträgern geschenkt. Da Festplatten allerdings häufig bis zu ihrem tatsächlichen physischen Ende in Gebrauch sind, sind die anfallenden Mengen eher gering. Dennoch fallen gelegentlich noch funktionsfähige Datenträger an, die aufgrund ihrer zu geringen Kapazität ausgemustert werden. In jedem Fall (ob funktionsfähig oder defekt) wird durch physikalische Maßnahmen sichergestellt, dass eine Rekonstruktion der Daten ausgeschlossen ist.

3.5. (Applikations-)Server

Als Applikationsserver werden sowohl Datenbank- als auch Anwendungsserver bezeichnet, die verschiedene Aufgaben für die angeschlossenen Clients übernehmen.

3.5.1. Die wissenschaftlichen Abteilungen

Für die Datenbanksysteme (ACD auf Basis von Oracle zum Speichern von Spektren und anderen wissenschaftlichen Daten sowie Claks auf Basis von SciDex zur Chemikalienlagerverwaltung) wird ein Datenbankserver eingesetzt. Es handelt sich dabei um einen Windows 2000 Advanced Server mit zwei Pentium III 1,4 GHz Prozessoren (ipb4). Der Zugriff erfolgt hier auch wieder über die TCP/IP-Verbindungen mit der Anwendungssoftware. Zusätzlich fungiert ipb4 als sekundärer Domaincontroller für die Domäne MAIL-IPB-HALLE. Weitere spezielle (Web-)Applikationen sind auf Servern in den Arbeitsgruppen Computerchemie bzw. Bioinformatik installiert.

3.5.2. Verwaltung

Für die Verwaltung mit den Bereichen Buchhaltung und Personalwesen sind von den wissenschaftlichen Abteilungen getrennte Server im Einsatz, um den unbefugten Zugriff auf diese Daten besser verhindern zu können. Als Applikationsserver für die Buchhaltung sowie als Datenbankserver (Microsoft SQL Server) für die Arbeitsgruppe Personalwesen dient ein Compaq Pentium III 866 MHz Server mit Windows 2000 Advanced Server als Betriebssystem (verw-w2000.ipb-sub.ipb-halle.de). Der Zugriff auf diesen Server erfolgt über das TCP/IP-Protokoll mit entsprechender Clientsoftware und erfordert keine Betriebssystem-Benutzerkonten auf Applikationsserverseite.

3.6. Arbeitsplatzrechner

Die meisten Arbeitsplatzrechner dienen einfachen Aufgaben wie der Literaturrecherche, Erfassung und Auswertung von Experimentdaten und Textbearbeitung für Publikationen und

Berichten. Entsprechend gestalten sich die Anforderungen an Hardware- und Softwareausstattung.

3.6.1. Hardwareausstattung für APCs

Als APC werden "Nonames" angeschafft, da diese aus Standardkomponenten bestehen und daher maximale Kompatibilität gegeben ist. Somit sind Ersatz und als notwendig erachtete Erweiterungen in der Regel kurzfristig und preiswert verfügbar. Zudem sind Geräte von Markenanbietern durchaus nicht immer besser, dafür aber in der Regel deutlich teurer.

Bei den Spezialanwendungen und Geräten ergibt sich im Vergleich zu der Beschaffung der üblichen Server und APC noch ein spezielles Problem: Oft bieten die Hersteller Komplettsysteme inklusive Hard- und Software an. Dabei muss man die Hardware (im Vergleich zu den "Nonames") recht teuer bezahlen. Allerdings ist gerade diese Spezialsoftware häufig mit extrem vielen Bugs behaftet und im Reklamationsfall stellt sich, wenn die Hardware getrennt beschafft wird, immer die Frage, ob die Hardware den Anforderungen der Software nicht genügt. Diese Fälle führen dann zu einer höchst zeitraubenden Dreiecksschuldzuweisung zwischen IPB, Hard- und Softwarelieferant. Im Falle von notwendigen Serviceleistungen kann dies auch sehr teuer werden. Es ist also durchaus abzuwägen, ob die zunächst teurere Komplettlösung bei mit Spezialsoftware gekoppelten Geräten nicht die bessere Wahl ist.

3.6.2. Softwaregrundausstattung für APCs

Auf den Arbeitsplatzrechnern am Institut werden in der Regel Microsoft Windows 2000 Professional oder Windows XP Professional, Microsoft Office 2000, Adobe Acrobat, Mozilla Firefox und Mozilla Thunderbird installiert. Die Entscheidung für Windows wurde in der Vergangenheit unter anderem aufgrund der Masse der für Windows verfügbaren Anwendungssoftware gefällt. Das alternative Betriebssystems Linux kommt momentan für einen breiten Einsatz auf Arbeitsplatzrechnern nicht in Frage, da dadurch der Datenaustausch mit der wissenschaftlichen Community erheblich erschwert würde und es für viele der eingesetzten Programme (siehe auch Abschnitt Spezialsoftware) noch keine entsprechenden Linux-Versionen gibt. Die weitere Entwicklung wird jedoch am Institut verfolgt und eine zukünftige Migration nicht generell ausgeschlossen.

3.6.3. Spezialsoftware

Die Art der am Institut anfallenden, mit Informations- und Kommunikationstechnik zu lösenden Problemstellungen erfordert den Einsatz verschiedenster Softwarepakete. Dabei soll in diesem Abschnitt nicht auf die im technischen Teil behandelten Aspekte der Softwaregrundausstattung für Standard-APCs eingegangen werden. Neben den Standardaufgaben, wie Textverarbeitung, Tabellenkalkulation und Internetrecherche, fallen jedoch häufig auch Aufgaben wie Zeichnen von chemischen Strukturformeln, Bildbearbeitung, statistische Aufbereitung von Messdaten, Auswertung von Spektren oder Verwaltung von Literaturstellen an. Auch für diese spezielleren Fälle wird im Institut eine weitgehende Standardisierung angestrebt. Das Gremium hierfür ist die EDV-Kommission. Im Rahmen der Arbeit dieses Gremiums wurden für verschiedene Anwendungsfälle Empfehlungen ausgearbeitet, von denen nur in begründeten Ausnahmefällen abgewichen werden darf. Bei der Erarbeitung dieser Empfehlungen wurden folgende Gesichtspunkte berücksichtigt:

- **Leistungsfähigkeit und Zuverlässigkeit des Softwarepakets**
  - Die Software muss weiteste Teile des Anforderungsspektrums abdecken.
  - Das Softwarepaket soll im Vergleich mit Konkurrenzprodukten eine hohe Funktionssicherheit aufweisen.

- **Preis- und Lizenzierungsfragen**
  - Der Einsatz der Software muss sich unter wirtschaftlichen Gesichtspunkten rechtfertigen lassen; bei Gleichheit in den wesentlichen Punkten der übrigen Kriterien ist freier Software der Vorzug zu geben.
  - Bei kommerzieller Software ist die Beschaffung von institutsweiten oder je nach Wirtschaftlichkeit auch *floating*-.Lizenzen anzustreben, da diese Lizenzierungsmodelle breiteste Verfügbarkeit und umstandslose Lizenzverwaltung ermöglichen.

- **Kompatibilität**
  - Die Kompatibilität des Datenformats mit den in der wissenschaftlichen Community verwendeten Formaten muss gewährleistet werden.
  - Die Interaktion mit anderen Anwendungen soll möglichst reibungslos verlaufen.

- **Erfahrungen und bereits installierte Basis**
  - Zur Minimierung des Migrationsaufwandes (Installationsaufwand, Mitarbeiterschulung usw.) ist bei der Neubeschaffung die bereits am Institut installierte Software zu berücksichtigen.
  - Außerhalb des Instituts gemachte Erfahrungen (unabhängige Testberichte usw.) sollen in die Bewertung einfließen.

Unter Berücksichtigung dieser Leitlinien wurden von der EDV-Kommission folgende Standardapplikationen benannt:

Problemstellung	Softwarepaket
Literaturstellenverwaltung	Reference Manager (EndNote)
Graphische Datenaufbereitung	Excel und SigmaPlot (nur bei Bedarf: Origin)
Bildbearbeitung (Vektorgraphik)	Corel Draw
Bildbearbeitung (Bitmaps)	Photoshop (evtl. Gimp)
Graphische Layoutgestaltung	QuarkXPress
Chemische Strukturformeln	ChemDraw
Spektrenauswertung	ACD
Sequenzanalyse	DNA-Star
Chemikalienverwaltung	CLAKS

Programme mit *floating* oder institutsweiter Lizenz wie ChemDraw, ACD, CLAKS oder Reference Manager werden dabei auf möglichst vielen Rechnern installiert, um Mitarbeitern einen einfachen Zugang zu diesen Programmen zu ermöglichen. Aus demselben Grund sollen Eigenentwicklungen, die von allgemeinem Interesse sind, nach Möglichkeit als Webapplikationen realisiert werden.

Die besonderen Anforderungen an Mess- und Steuerrechner sowie die spezifischen Bedürfnisse der Arbeitsgruppen Bioinformatik und Computerchemie verhindern weitgehend eine Vereinheitlichung. Gründe hierfür liegen unter anderem in Herstellervorgaben einerseits und in der Vielzahl und ständigen Aktualisierung der wissenschaftlichen Software andererseits. Der administrative Aufwand bleibt jedoch aufgrund langer Releasezyklen für Mess- und Steuersoftware bzw. durch Zentralisierung und die Beschränkung auf wenige Rechner (Bioinformatik / Computerchemie) beherrschbar (vgl. auch Abschnitt zur angestrebten Netzwerkhomogenität im technischen Teil).

3.6.3.1. Reference Manager (Endnote)

Bei der Abfassung wissenschaftlicher Veröffentlichungen stellen die Verwaltung von Literaturstellen und die Erstellung einer Bibliographie wichtige Teilaspekte dar, die durch die Verwendung entsprechender Software effizient gestaltet werden können. Das IPB setzt für diese Zwecke die Programme Reference Manager bzw. EndNote ein (siehe auch Softwarestandardisierung). Unter Netzwerkgesichtspunkten ist hier jedoch nur das Programm Reference Manager interessant, da es mehreren Nutzern die gleichzeitige Nutzung einer Litera-

turdatenbank gestattet. Deshalb soll in den nächsten Jahren dazu übergegangen werden, am Institut einheitlich nur noch den Reference Manager zu verwenden.

3.7. Mittelfristige Perspektiven

Die wirtschaftliche Lage hat zweifellos Konsequenzen für den Ausbau und die Aufrechterhaltung der informationstechnischen Infrastruktur des IPB. Sparsamer Umgang mit den monetären Mitteln muss daher konsequent umgesetzt werden. Andererseits darf nicht übersehen werden, dass es nicht möglich ist, das erreichte Niveau ohne ein gewisses Maß an finanziellen Aufwendungen aufrechtzuerhalten.

3.7.1. Server und Clients

Die Ausstattung mit Clients und Servern hat insgesamt ein sehr hohes Niveau erreicht. Eine weitere Ausweitung der Anzahl der APC ist daher wahrscheinlich nur in sehr geringem Maße notwendig, sodass die Beschaffungsmaßnahmen in diesem Bereich überwiegend dem Ersatz defekter und veralteter Hardware dienen dürften. Zu größeren finanziellen Belastungen dürfte es aber durch die Einführung eines leistungsfähigen Storage- und Backupsystems kommen. Das Konzept in der derzeitigen Planungsphase sieht folgendermaßen aus:

3.7.2. Neuere Entwicklungen

Für das Institut absehbare neue Entwicklungen im IT-Bereich betreffen neben den im wissenschaftlichen Teil aufgeführten Planungen in erster Linie die Einführung neuer Hardwarearchitekturen im Bereich von APC und Servern, wobei derzeit eine weitere Aufrüstung bei den Servern nicht ansteht. Bei den APC wird aber auf die neuen Techniken wie PCI-Express, BTX-Architektur und 64 Bit Prozessoren zurückgegriffen, wenn neue Computer angeschafft werden, da dies der neue Standard und bereits im Preis nahezu gleich dem der älteren Technik ist. Bei der Software wird eine Umstellung von Windows 2000 auf Longhorn frühestens 2007 erforderlich sein. Auch hier ist nicht davon auszugehen, dass alle Rechner auf einmal upzudaten sind. Vielmehr betrifft auch dies wohl überwiegend Neuanschaffungen und nur in Einzelfällen APC, die Software mit den entsprechenden Betriebssystemanforderungen betreiben.

3.8. Software

Die zum Teil erheblichen, ständig steigenden Kosten für kommerzielle Softwarelizenzen erfordern auch zukünftig ein planmäßiges Vorgehen bei Neubeschaffung, Upgrades oder Migrationen. Die Vielfalt der zu berücksichtigenden Software und die Unterschiedlichkeit der Lizenzmodelle machen verallgemeinernde Aussagen jedoch praktisch unmöglich. Letztendlich werden die Entscheidungen zugunsten bestimmter Produkte oder Verfahrensweisen im Rahmen der EDV-Kommission anhand der oben aufgeführten Stichpunkte gefällt werden.

Bei Arbeitsplatz-PCs wird derzeit davon ausgegangen, dass durch die Ausstattung mit Windows 2000 und MS Office auch noch in zwei Jahren alle wesentlichen Anforderungen abgedeckt sein werden. Durch die vom Hersteller Microsoft vorgegebenen Produktlebenszyklen (Extended Support für Win2k endet im Juli 2010) wird jedoch eine Migration auf eine neuere Betriebssystemversion (möglicherweise Windows Vista) unumgänglich. Mit dem Ende der

Verfügbarkeit von Sicherheitsupdates würde sonst die Sicherheit des Institutsnetzwerks sehr schnell kompromittiert werden.

Weitere Aufwendungen in nicht unerheblicher Höhe ergeben sich für die Aufrechterhaltung der Sicherheitssysteme. So ist die Antivirensoftware zwar prinzipiell auf unbegrenzte Zeit lizenziert, diese Lizenz beinhaltet aber nur für ein Jahr die Möglichkeit, die Virensignaturen zu aktualisieren (Maintenance). Diese Aktualisierung muss aber laufend (mindestens einmal pro Woche *via* Internet) erfolgen, da ansonsten neu auftauchende Computerviren nicht erkannt werden und das System nur noch eine Scheinsicherheit bietet. Zu diesem Zweck erwirbt das Institut jeweils zwei Jahre gültige Abonnements (ca. 2500 € pro Jahr). Nach jeweils drei bis vier Jahren ist ein Update auf eine neue Version (6000 €) jedoch unvermeidlich, da die Hersteller ihre Unterstützung für ältere Versionen einstellen und neue Antivirenengines der aktuellen Bedrohungslage besser angepasst sind.

3.9. Netzwerkinfrastruktur

Moderner Wissenschaftsbetrieb ist ohne vernetzte Rechner nicht mehr vorstellbar. Auch am IPB werden die vielfältigen Möglichkeiten der Vernetzung bereits auf breiter Basis genutzt. Die nach wie vor stürmische Entwicklung der Netzwerktechnologien erfordert jedoch – um wettbewerbsfähig zu bleiben – eine ständige Anpassung und Überarbeitung der Konzepte und die systematische Umsetzung in eine reale IT-Landschaft. Die Vielzahl der möglichen Gesichtspunkte bedingt, dass es leicht zu einer Begriffsverwirrung kommen kann. Wo nötig, werden zentrale Begriffe in den einzelnen Abschnitten daher jeweils genauer definiert.

Bei der Analyse und Konzeption von Netzwerken und Netzwerkanwendungen hat sich international das OSI-Schichtenmodell mit insgesamt sieben Schichten bewährt. Für die Zwecke dieses Konzepts ist jedoch die grobe Unterteilung in die rein technischen system- und hardwarenahen Aspekte (Schichten 1 – 4 im OSI-Modell) und die auch unter wissenschaftlichen Gesichtspunkten interessanten Netzwerkdienste (Schichten 5 – 7) zweckmäßiger. Bei der Betrachtung der Netzwerkdienste ist zudem die Unterscheidung zwischen ausschließlich internen (Intranet) und externen Diensten (Internet) sinnvoll.

Da Sicherheit in den letzen Jahren enorm an Bedeutung gewonnen hat und am besten nicht isoliert sondern als Teil des Gesamtkonzepts betrachtet wird, wird in den jeweiligen Abschnitten auf sicherheitsrelevante Aspekte eingegangen.

3.9.1. Netzwerktechnik

Der Begriff Netzwerktechnik soll in diesem Abschnitt die gesamten passiven und aktiven Netzwerkkomponenten wie Kabel, Server, Switches, Router usw. umfassen. Aus konzeptuellen Gründen werden die benutzten Protokolle wie TCP, UDP, IPX usw. ebenfalls in diesem Abschnitt behandelt.

3.9.1.1. Passive Netzwerkkomponenten

Für das Datennetz werden hochwertige Komponenten verwendet. Die Leitungen von den Verteilerstationen zu den Endgeräten (STP-Kabel) sind elektrisch abgeschirmt und nicht frei zugänglich verlegt. Ein Abhörrisiko ist somit weitgehend minimiert. Diese Kabel sind jeweils

sternförmig von den Hubs zu den Endgeräten verlegt, sodass der Ausfall eines Kabels nur den Betrieb des einen, an dieses Kabel angeschlossenen Gerätes beeinflusst.

Die einzelnen Gebäude sind über stör- und abhörsichere Glasfaserkabel miteinander verbunden. Dadurch werden auch Induktionsspannungen und Überspannungen bei Gewitter vermieden. Die Anschlussdosen werden nur nach Bedarf und Notwendigkeit freigeschaltet, um eine unkontrollierte Nutzung zu vermeiden und nicht unnötige Kapazitäten in Form von teuren Hubs vorhalten zu müssen.

3.9.1.2. Aktive Komponenten

Das Datennetz ist mit hochwertigen aktiven Komponenten ausgestattet, die eine hohe Verfügbarkeit gewährleisten. Alle aktiven Komponenten wie Server, Hubs und Switches werden permanent auf ihre Funktion hin überwacht und Ausfälle *via* SMS an die Administratoren gemeldet.

3.9.2. Protokolle und Adressen

Die Kommunikation im IPB-Netzwerk findet über TCP, UDP bzw. IPX und entsprechende Basisprotokolle (IPv4) statt. Bis auf wenige Ausnahmen (Webserver, Mailserver usw.) erhalten alle Rechner IPv4-Adressen aus dem privaten Class-C-Netz 192.168.0.0/16. Die Verwaltung der IP-Adressen erfolgt dynamisch über einen DHCP-Server. Das Class-C-Netz ist logisch in Subnetze mit je 255 IP-Adressen aufgeteilt; für IP-Verkehr wird die Verbindung zwischen den Subnetzen von einem Router hergestellt. Physisch ist das Netzwerk derzeit nicht segmentiert, sodass IPX-Datenverkehr ohne Routing transportiert werden kann. Die Verbindung zu externen Netzen (Internet) wird für Rechner im privaten Netz über NAT realisiert.

3.9.3. Sonstige Netzwerke

Abgesehen von der Verkabelung des Institutes bestehen noch weitere Zugangsmöglichkeiten zum internen Netz.

3.9.3.1. ISDN

Im Institut werden einige Softwareprodukte verwendet, die eine Fernwartung bzw. Ferndiagnose notwendig oder wünschenswert machen. Dafür steht ein ISDN Zugang zur Verfügung. Da dies eine potentielle Gefährdung darstellt, wird die entsprechende Zugangssoftware nur auf Anforderung der Servicestelle manuell gestartet und ist mit Passwort geschützt.

Des Weiteren wird eine ISDN-Verbindung zur Übertragung von Buchhaltungsdaten (Überweisungsaufträge, Zahlungsinformationen usw.) von und zur Bank genutzt. Der Datenverkehr wird aus Sicherheitsgründen über eine mehrstufig passwortgeschützte und verschlüsselte Direktverbindung geführt.

3.9.3.2. WLAN

Die Notwendigkeit für eine WLAN Infrastruktur ergibt sich aus mehreren Gründen: neue Anwendungen wie etwa die Erfassung von Daten bei der Pflanzenanzucht erfordern eine Netzverbindung z.B. in den Phytokammern und Gewächshäusern. Zum anderen steigt die Verbreitung von Laptops sowohl innerhalb des Institutes als auch unter den Gästen, die sich für

Forschungsaufenthalte und Vorträge am Institut aufhalten. Aus Sicherheitsgründen darf aus dem Drahtlosnetzwerk lediglich ein Radius-Server erreichbar sein; der Zugriff auf die übrigen Ressourcen des Institutsnetzwerks darf erst nach erfolgreicher Authentifizierung möglich sein. Für die Zukunft ist eine WLAN Infrastruktur am IPB geplant.

3.9.3.3. VPN

Als Virtuelles Privates Netzwerk wird eine verschlüsselte Verbindung zwischen zwei Netzen oder einem entfernten Rechner und einem Netzwerk verstanden. Dadurch werden die Kommunikationspartner logisch einem gemeinsamen Netz zugeordnet, und haben den vollen Zugriff auf alle Ressourcen. Meistens wird mit einem solchen Tunnel eine unsichere Verbindung über etwa das öffentliche Internet oder ein WLAN überbrückt. Die vorgeschaltete Authentifizierung sichert zusammen mit der kryptografischen Verschlüsselung gegen Angriffe von außen. Ein VPN Zugang ist in Zukunft am IPB geplant.

3.10. Sicherheit

Wie andere Sachgüter auch, sind Computer, Netzwerke und die gespeicherten Daten in ihrem Fortbestand einer ständigen Bedrohung ausgesetzt. Die Bedrohungsszenarien sind ausgesprochen vielfältig und bedürfen einer individuellen Adressierung. Für einen wirksamen Schutz sind sorgfältige Analysen notwendig, die in entsprechenden konkreten Maßnahmen münden müssen. Wie bei der klassischen Sicherung eines Gebäudes vor Einbruch entscheidet auch bei der Computer- und Datensicherheit das schwächste Glied über den erreichten Schutzgrad. Durch die ständige Fortentwicklung der Computer- und Softwaretechnik auf der einen und der Bedrohungen auf der anderen Seite kann Sicherheit nicht als ein statisches, einmal zu erledigendes Problem betrachtet werden. Vielmehr muss auch die Gewährleistung der Sicherheit als ein Prozess betrachtet werden. Erfahrungsgemäß gestaltet sich dieser Prozess um so effizienter, je zeitiger er in das übrige Entwicklungskonzept eingebunden wird. Aus diesem Grund wird angestrebt, Sicherheit nicht losgelöst vom übrigen Konzept, sondern als integralen Bestandteil der jeweiligen einzelnen Aspekte der IT-Konzeption zu betrachten.

3.10.1. Bedrohungsanalyse

Für eine Bedrohungsanalyse ist es zunächst sinnvoll, sich einen Überblick über den Umfang der schützenswerten Daten und wissenschaftlichen Informationen sowie des Inventars mit seinen jeweiligen spezifischen Eigenschaften zu verschaffen. Am IPB lässt sich das Inventar grob in folgende Klassen einteilen:

- Netzwerkinfrastruktur mit aktiven und passiven Komponenten,
- Server und angeschlossene Peripherie (Storage-Systeme, Backup-Libraries etc.),
- die individuellen Arbeitsplatzrechner nebst Peripherie (Drucker etc.),
- die gespeicherten Daten,
- Softwarelizenzen.

Als wichtiges Maß für den Schutzbedarf kann dabei der Wiederbeschaffungswert bzw. der mögliche wirtschaftliche Schaden angesehen werden, wobei Verletzungen von Persönlich-

keitsrechten oder die Schädigung der wissenschaftlichen Reputation nur schwer auf diese Weise zu quantifizieren sind. Allen physischen Inventargegenständen ist gemein, dass sie durch technischen Ausfall und Vandalismus und Diebstahl bedroht sind. Die Gesamtheit der Anlagen und Daten ist zudem durch unautorisierten Zugriff und Fehlbedienung gefährdet. Die potentiellen Folgen eines Ernstfalles umfassen:

- **Datenverlust:**
  Zerstörung des Datenträgers, der logischen Datenträgerstruktur oder die Löschung von Daten,

- **Datenmanipulation:**
  unautorisierte oder unbeabsichtigte Veränderung von Daten,

- **Nutzungsausfall:**
  Gerätedefekte, unautorisierte Konfigurationsänderung und Denial of Service,

- **Verletzung von Dienstgeheimnissen oder Persönlichkeitsrechten:**
  Abhören des Datenverkehrs und Ausspähung gespeicherter Daten,

- **Verletzung fremder Rechtsgüter**

Die Gefährdung geht nicht nur von externen Angreifern aus, sondern auch von Mitarbeitern. Sie muss nicht unmittelbar erfolgen, z.B. durch Datenklau, sondern kann auch mittelbar durch Schadprogramme (Viren, Würmer usw.) gegeben sein.

3.10.2. Abwehrmaßnahmen

Vorab ist zu konstatieren , dass in der komplexen IT-Welt heute und wohl auch in Zukunft niemand 100%ige Sicherheit garantieren kann. Durch Abwehrmaßnahmen können jedoch sowohl die Schadenswahrscheinlichkeit als auch die potentielle Schadenshöhe positv beeinflußt werden. Im Sinne einer wirtschaftlich verantwortungsvollen Herangehensweise muß das Institut bestrebt sein, ein Optimum entlang beider Koordinaten zu finden.

3.10.2.1. Abwehr von Diebstahl und Vandalismus

Besonders kritische Komponenten (Server, Netzwerkkomponenten) sind in abgeschlossenen Räumen bzw. Schränken untergebracht, zu denen nur ausgewählte Mitarbeiter Zutritt bzw. Zugriff haben. Der zentrale Serverraum wird zudem durch eine Alarmanlage gesichert. Die Arbeitsplatz-PCs können aufgrund ihrer Zahl und ihrer verteilten Aufstellung weniger stark gesichert werden. In der Vergangenheit kam es daher mehrfach zu Einbruchdiebstählen. Seitdem das Institut von einer Einbruchmeldeanlage und einem Wachdienst geschützt wird, sind Diebstähle und Vandalismus sehr stark zurückgegangen.

3.10.2.2. Abwehr von technischen Ausfällen

Auf die Bedrohung durch technische Ausfälle kann auf verschiedenen Wegen reagiert werden:

- redundante Auslegung der technischen Einrichtung,
- Verwendung besonders hochwertiger Komponenten,
- Abschluss entsprechender Wartungsverträge bzw. Service-Level-Agreements zur Minimierung der Ausfallzeiten,
- Optimierungen im Hinblick auf (eigene) Reparaturmöglichkeiten und Ersatzteilversorgung
- Herstellung besonders günstiger Betriebsbedingungen (Klimatisierung und unterbrechungsfreie Stromversorgung),
- Einsatz von Möglichkeiten zur Fehlerfrüherkennung und Fernwartung.

Welche dieser Möglichkeiten für einen bestimmten Teil der Infrastruktur ins Auge gefasst werden, ist von der Bedeutung dieses Teils für das Gesamtsystem abhängig. Für die File- und Datenbankserver werden am Institut folgende Maßnahmen gegen technischen Ausfall getroffen: Es werden speziell für den Serverbetrieb konstruierte Computer (Serverhardware) beschafft. Festplatten werden in RAID-Systemen gekoppelt, sodass der Ausfall einer Platte keinen Datenverlust zur Folge hat. Die Server sind außerdem mit speziellen Sensoren ausgerüstet um Lüfter, Temperatur und andere Parameter permanent zu kontrollieren und Störungen ggf. sofort zu melden. Der Serverraum ist mit einer Klimatisierung ausgestattet und die Raumtemperatur wird durch eine zentrale Leittechnik überwacht. Das gesamte Institut ist zudem mit einer Brandmeldeanlage mit direkter Leitung zur Feuerwehr ausgestattet und die Server sind von Räumen mit besonderer Brandgefährdung (Chemielabore, Chemikalienlager) ausreichend räumlich getrennt untergebracht. Zum Schutz vor Stromausfall sind alle Server über unterbrechungsfreie Stromversorgungen an das IPB-Sicherheitsnetz angeschlossen. Das Sicherheitsnetz wird bei Stromausfall durch ein Notstromaggregat versorgt.

3.10.2.3. Abwehr von unautorisiertem Zugriff

Die Verhinderung unautorisierten Zugriffs ist ein komplexes Thema, da sie die vollständige Abdichtung aller Systeme, Dienste und Übertragungswege zum Ziel haben muss, um effektiv wirksam zu sein. Das bedeutet, dass die physikalischen Übertragungswege entweder durch Verschlüsselung oder baulich vor unbefugtem Zugriff geschützt werden müssen. Sämtliche nicht öffentlichen Dienste dürfen nur nach Authentifizierung benutzbar sein. Dies schließt ein, dass bekannte Sicherheitslücken dieser Dienste umgehend geschlossen werden. Zu konkreten Maßnahmen gehören unter anderem die Verwendung einer Firewall, eines Web-Proxys, zentraler Nutzerauthentifizierung und von Antivirensoftware (siehe entsprechende Abschnitte).

Des Weiteren müssen Systeme implementiert werden, welche den selektiven Zugriff auf Daten nach entsprechenden Zugangsebenen (Abteilungsleiter, Gruppenleiter, sonstige Mitarbeiter) erlauben. Dies schließt gleichfalls die Behandlung vertraulicher Daten Dritter ein.

Die Rechte der Nutzer werden von den Systemadministratoren vergeben und kontrolliert, wobei Schreibrechte nur für eigene Dateien und Verzeichnisse sowie für öffentliche Verzeichnisse der Abteilung bzw. des Institutes gewährt werden. Zusätzliche Zugriffe mit Leseberechtigung beschränken sich auf öffentlich zur Verfügung gestellte Daten- und Programmverzeichnisse.

3.10.2.4. Schutz vor Virenattacken

Hier gibt es mehrere Ebenen des Schutzes. Zunächst blockt die Firewall Virenattacken aus dem Internet ab, die über offene Ports Schwachstellen des Betriebssystems oder der Anwendungssoftware ausnutzen.

Da wir unsere Mails nur über den Mailserver der MLU Halle empfangen, werden Emails durch zwei verschiedene Antivirus-Scanner geprüft. Das erhöht die Filterwirkung deutlich.

Der Empfang von Mail-Anhängen die ausführbaren Code enthalten (.exe, .pif, .scr etc.) wird unterbunden, da derartige Dateien ein bevorzugtes Mittel von Hackern zur Verbreitung von Viren darstellen. In begründeten Fällen können diese Dateien nach einer Prüfung aus der Quarantäne entlassen und dem Benutzer zur Verfügung gestellt werden.

Die nächste Ebene stellen die APC dar. Alle Rechner sind mit einem Antiviruscliient ausgestattet, dessen Virensignaturen ebenfalls täglich aktualisiert werden. Dieses Update erfolgt vom Internen "Antivirenserver" um die Internetlast nicht unnötig in die Höhe zu treiben.

In Bezug auf die Planung eines WLAN und die verstärkte Nutzung privater Laptops sind hierzu aber noch erweiterte Überlegungen - auch lizenzrechtlicher Art - notwendig, da gerade mobile private Geräte ein Sicherheitsrisiko erster Güte darstellen.

Als weitere Ebene ist die Art der verwendeten Software anzusehen. Obwohl es keine wirklich sichere Software gibt, gibt es doch Software die unsicherer ist als andere. Besonders die Microsoft Produkte sind in der Vergangenheit unrühmlich aufgefallen. Aus diesem Grunde wird auf die Verwendung von IIS und Windows auf dem WWW Server verzichtet. Bis auf die Abteilung Natur- und Wirkstoffchemie (Internet Explorer) wird Firefox als Standardwebbrowser eingesetzt. Lediglich beim Emailserver musste wegen der komplexen Funktionalität von MS Exchange auf diese Software zurückgegriffen werden.

Für die Windows-PCs werden Sicherheits-Updates von Microsoft über einen WSUS-Server vorgehalten und verteilt. Über die Einstellungen der Gruppenrichtlinie bzw. Registry-Einstellungen wird dafür gesorgt, dass alle Windows-PC´s diese Updates automatisch installieren. Gleichzeitig wird durch diesen Server das Online-Datenvolumen begrenzt.

3.10.2.5. Die Firewall

Neben der Einschleppung von Viren bietet ein Netzwerk noch eine ganze Reihe anderer Angriffsvektoren, deren Aufzählung in diesem Konzept jedoch wenig Sinn ergeben würde. Ein Großteil dieser Angriffsvektoren kann jedoch durch den Einsatz einer Firewall eliminiert werden. Das IPB schützt sein Netzwerk durch Einsatz einer Firewall; entsprechende Ausführungen finden sich im Abschnitt „Netzwerke“ dieses Konzeptes.

3.10.3. Zusammenfassende Wertung

Die Sicherheit des gesamten Datennetzes als auch der gespeicherten Daten stellt eine große Herausforderung dar und bestimmt einen wesentlichen Anteil der Arbeit des IT-Personals im IPB. Durch die sich ständig ändernde Bedrohungslage und den immer breiteren Einsatz von IT in allen Bereichen müssen Maßnahmen getroffen werden, um auch weiterhin den Anforderungen gewachsen zu sein. Insbesondere muss dabei klar sein, dass ein einmal erreichter Sicherheitszustand ohne kontinuierliche Maßnahmen in relativ kurzer Zeit nicht mehr ausreichend sein wird. Eine ständige Aktualisierung der sicherheitsrelevanten Hard- und Software sowie die Weiterbildung in Hinsicht auf aktuelle und möglichst auch auf künftig zu erwartende Bedrohungsszenarien sowie die dagegen zu ergreifenden Schutzmaßnahmen muss personell und finanziell abgesichert werden.

Hier ist auch eine Sensibilisierung sowie Schulung und Anleitung der Nutzer im sicheren Umgang mit dem Medium Internet sowie in Bezug auf ihre Verantwortung und ihre Möglichkeiten zur Sicherheit ihrer Datenbestände von großer Bedeutung. Die Wirksamkeit der bisher getroffenen Maßnahmen wird indirekt durch folgende Faktoren messbar:

- Zeitweise durch Viren hervorgerufene Probleme im internen Netzwerk spielen seit geraumer Zeit praktisch keine Rolle mehr. Verseuchte Mails, die den Uni-Mailserver passiert haben, werden auf dem IPB-Mailserver abgefangen.

- Erfolgreiche Hackerattacken konnten bisher nicht festgestellt werden, erfolglose Versuche dagegen in erheblicher Anzahl.

- Attacken zum Missbrauch unserer Server und PC´s (SMTP-Sender in Viren) werden unterbunden.

- Es gibt keinen Hinweis auf unbefugten Zugriff auf wichtige, sensible oder personenbezogene Daten.

Allerdings gab es in Einzelfällen durchaus Datenverluste durch Hardwaredefekte (Festplatten) auf einzelnen APC. Das zeigt einmal mehr, dass Datensicherheit eine Gesamtproblematik aller Mitarbeiter ist, die durch administrative Maßnahmen allein nicht vollständig realisierbar ist. Außerdem wird dem bei zukünftigen Beschaffungen Rechnung getragen.

3.11. Datensicherung und –archivierung

Die Bereiche Datensicherung und -archivierung haben unterschiedliche Zielsetzungen, werden aber in modernen Konzepten nicht mehr notwendigerweise isoliert voneinander betrachtet. Zum Bereich der Datensicherung gehört der Schutz vor Datenverlust und –manipulation.

3.11.1. Datensicherung für die Wissenschaft

Die Notwendigkeit zur Archivierung ist bereits durch die DFG Richtlinien zu guter wissenschaftlicher Praxis gegeben. Darin wird gefordert, die Primärdaten und Ergebnisse von Projekten und Publikationen über einen Zeitraum von zehn Jahren zu archivieren.

Diese Anforderung kann weder durch die individuelle Archivierung auf z.B. CD Roms durch

die einzelnen Wissenschaftler, noch durch das tägliche Backup erfüllt werden. In beiden Fällen sind weder die langfristige Les- und Verfügbarkeit der Daten garantiert, noch wird eine Struktur der Daten vorgegeben. Letztere muss durch eine dokumentierte Richtlinie festlegen, welche Art von Daten (Rohdaten, Metadaten, Zwischenergebnisse, verwendete Software etc.) gesichert werden müssen. Außerdem muss die Wiederauffindbarkeit durch ein zentrales Inhaltsverzeichnis der Daten auch über die Präsenz einzelner Mitarbeiter hinaus gewährleistet sein. Die Vertraulichkeit beispielsweise patentrelevanter Daten oder Daten Dritter muss dabei gewährleistet bleiben.

In den einzelnen Communities existieren mittlerweile Empfehlungen, wie die „Minimum Information about Microarray Experiments (MiaME)" oder ähnliche Richtlinien für Proteomics- und Metabolomics Projekte, die den Umfang der zu archivierenden Daten beschreiben. Sinngemäß lassen sich diese Anforderungen auf die meisten der wissenschaftlichen Projekte am IPB übertragen. Entsprechend muss die Zielstellung für die kommenden Jahre lauten, für die einzelnen Datenquellen Richtlinien für Aufbewahrungsfristen, -umfänge und -formate aufzustellen, zu dokumentieren und technisch umzusetzen. Besonderes Augenmerk ist dabei darauf zu legen, dass auch die für die Interpretation der Datenformate notwendige Software lauffähig archiviert wird. Zudem müssen, soweit noch nicht vorhanden, beschreibende elektronische Verzeichnisse angelegt werden. Idealerweise sollten diese Verzeichnisse in eine zentrale Inhouse-Datenbank integriert werden. Die Begleitung der technischen Planungs- und Realisierungsphase von Anwenderseite wird dabei als Faktor für den Erfolg des Vorhabens gesehen.

3.11.2. Technische Datensicherung

Die am IPB auf Festplatten gespeicherte Datenmenge umfasst mittlerweile ein Volumen von mehreren Terabyte, von denen zwei bis vier TByte gesichert (Backup) und archiviert werden müssen. Diese Daten sind dabei über viele verschiedene Dateisysteme, vorwiegend Server und wenige Clients verteilt. Die Daten der Server werden dabei über ein regelmäßiges, automatisches Backup an einen räumlich von den Servern getrennten Standort gesichert. Es obliegt - mit wenigen Ausnahmen - der Verantwortung der Nutzer, zu entscheiden, welche Daten durch Speicherung auf Servern in die Datensicherung einbezogen werden und welche Daten als lokal gespeicherte Daten lediglich temporär von Bedeutung sind. Diese Entscheidung kann im Allgemeinen nicht an das IT-Personal delegiert werden (Ausnahmen sind z.B. Buchhaltungsdaten), da in der Regel nur die Nutzer die Wichtigkeit, Einmaligkeit oder Geheimhaltungsbedürftigkeit ihrer Daten einschätzen können. Eine Sicherung oder gar Archivierung sämtlicher Daten wird auch zukünftig nicht notwendig sein, da im laufenden Betrieb üblicherweise große Mengen nicht sicherungswürdiger Daten (Browsercaches etc.) anfallen. Zudem müsste für eine Gesamtsicherung aller Daten für jeden einzelnen Computer am Institut eine teure Backupclient-Lizenz angeschafft werden. Insgesamt lässt sich also leicht die Unwirtschaftlichkeit der Sicherung sämtlicher anfallender Daten erkennen.

Die Sicherung der Daten erfolgt zurzeit mit verschiedenen Geräten: Im Jahr 2001 wurde zur Backup-Sicherung der Server ein 18-Slot AIT-1 Autoloader mit 900/1800 GByte Gesamtkapazität, komplementiert durch einen NAS-Server mit inzwischen 250 GByte Speicherkapazität, beschafft. Die rasant wachsende Datenmenge – insbesondere durch Simulationsdaten der Arbeitsgruppe Computerchemie – führte dazu, dass der Autoloader bereits im Herbst 2004 seine Kapazitätsgrenze erreichte und die Sicherungskapazität aufgestockt werden musste. Dies erfolgte durch die Beschaffung einer modularen, über Fibrechannel ange-

schlossenen HP-Tapelibrary mit 36 Slots und zwei LTO2-Laufwerken. Die Kapazität des Systems erlaubt die Vorhaltung von mehreren vollständigen sowie zusätzlichen inkrementellen Sicherungen, sodass bei Bedarf aus einer Historie von ca. 14 Tagen zurückgesichert werden kann. Durch die modulare Konstruktion ist die zukünftige Erweiterung auf eine Kapazität von 104 TByte möglich. Da moderne Laufwerke durchweg mit hohen Datenraten gefüttert werden müssen, da sonst die Haltbarkeit der Laufwerke dramatisch sinkt, erfolgt die Sicherung unter Einbeziehung eines SAN-Volumes mit 1,4 TByte im Rahmen einer *„disc2disc2 tape"*–Lösung. Als Backup-Software wird das Produkt „BackupExec V.10" zur täglichen automatischen Sicherung aller Daten auf File-, Datenbank- und Applikationsservern eingesetzt. Die Software erlaubt auch die einfache Kontrolle der ordnungsgemäßen Sicherung und des verfügbaren Speicherplatzes. Bei der Sicherung der Linux- / Unix-Server müssen jedoch starke funktionale Beeinträchtigungen hingenommen werden, weshalb – im Verbund mit dem Problemkreis Archivierung – über ein Upgrade bzw. eine Migration nachgedacht wird (s.u.).

Zur Langzeitarchivierung werden am Institut momentan zwei Verfahren eingesetzt: Revisionssicher zu archivierende Daten (Buchungsdaten, Personalakten usw.) werden auf magnetooptische Datenträger mit einer Kapazität von 9 GByte je Datenträger gesichert. Die Datenträger werden dabei von einer 24 Slot MO-Jukebox für die Anwender zur Verfügung gestellt, die zurzeit an den Server ipb3 angeschlossen ist. Von den Herstellern wird die Lesbarkeit der Datenträger für mindestens 30 Jahre garantiert, wobei sich die Frage nach dann vorhandenen Lesegeräten und der passenden Software stellt. Nachteilig ist der vergleichsweise hohe Preis der Datenträger. Neben der Sicherung auf MO werden archivierungspflichtige Daten von den Nutzern auf CD-ROM gebrannt. Der geringe Preis von CD-Rohlingen lässt dieses Verfahren zunächst sehr wirtschaftlich erscheinen, jedoch liegen mittlerweile auch Erfahrungen über die teilweise nur begrenzte Haltbarkeit dieser Medien vor. Zudem besteht bei dezentraler Archivierung eine höhere Gefahr, dass Daten (z. B. durch Ausscheiden von Mitarbeitern) unauffindbar werden. Das Medium der Wahl für die Aufbewahrung großer Datenmengen stellt nach wie vor die Magnetbandkassette dar. Mit neueren Standards (z.B. LTO3) ist auch die Möglichkeit zur revisionssicheren Archivierung gegeben. Eine dezentrale Sicherung auf Magnetbandkassetten ist jedoch aufgrund der hohen Kosten (mehrfach vorgehaltene Laufwerke) und der inhärenten Unsicherheit von isolierten Lösungen außerhalb jeder Diskussion.

Fernziel sollte stattdessen die zentrale Archivierung aller archivierungspflichtigen Daten und die Einführung eines Information Lifecycle Managements[2] (ILM) sein. Aufgrund der Komplexität eines solchen Vorhabens wird das IPB die Möglichkeiten der Beratung durch externe Sachverständige nutzen.
Ausgehend vom Ist-Zustand ist dafür unter anderem die Zentralisierung und Konsolidierung der Speicherorte (Weiterentwicklung der derzeitigen Kombination von NAS-Servern und mehreren herkömmlichen Fileservern zu einem SAN), die Migration des Backupsystems und die Erarbeitung von Archivierungs- und Aufbewahrungsrichtlinien durch die Anwender zu planen. Zur Erhöhung des maximal möglichen Datendurchsatzes ist außerdem kurzfristig der momentan vorhandene FibreChannel-Hub durch einen FibreChannel-Switch zu ersetzen. Die zu beschaffende Management-Software (Backup & Archiv) soll möglichst nutzer-

[2] Information Lifecycle Management bezeichnet die Strategien, Methoden und Anwendungen um Informationen automatisiert entsprechend ihrem Wert und ihrer Nutzung optimal auf dem jeweils kostengünstigsten Speichermedium bereitzustellen, zu erschließen und langfristig sicher aufzubewahren. (Quelle: wikipedia.de)

freundlich sein, damit für Standardaufgaben wie die Wiederherstellung von versehentlich gelöschten Dateien nicht die Administratoren bemüht werden müssen. Zudem müssen alle am Institut relevanten Plattformen (Windows, Netware, Linux, Solaris) von der Software unterstützt werden. Aufgrund der Komplexität des Gesamtvorhabens sollte die Investitionssicherheit ebenfalls ein wichtiges Kriterium bei der Auswahl sein. Die hohe Bedeutung, die der Datensicherheit beizumessen ist, verlangt perspektivisch außerdem eine redundante Auslegung der wichtigsten Komponenten (Bandlaufwerke etc.), da ansonsten Schäden an Schlüsselkomponenten zu Ausfällen von vier bis 21 Tagen des gesamten Backup-/ Archivsystems führen würden.

3.12. Ausblick

Der ständig steigende Bedarf an Speicherkapazität führt zu Problemen, die fortlaufend im Auge behalten werden müssen. Bei der Beschaffung der IT-Hardware wird darauf Wert gelegt, dass diese, soweit es wirtschaftlich vertretbar ist, den aktuellen Standards entspricht und zukunftsorientiert ist. Außerdem muss sie in der Kapazität ausbaufähig sein und sehr zuverlässig arbeiten. Dies konnte in den letzten Jahren fast immer erreicht werden.

3.13. Einsatz des IuKT-Personals und zentraler Service

Die Ausstattung des Institutes mit moderner Informations und Kommunikationstechnik begann erst mit der Neugründung im Jahre 1992. Innerhalb dieser 14 Jahre ist ein sehr guter Ausstattungsgrad erreicht worden. Entsprechend rasant verlief auch die Entwicklung der Anforderungen und Aufgaben des IT-Personals. Neben einer zielgerichteten Erweiterung der Ausstattung mit APC und Servern musste auch eine netzwerkfähige Infrastruktur geschaffen werden. Dafür mussten zeitweise zunächst Provisorien eingerichtet werden, die dann, im Zuge der im Hause schrittweise vorgenommenen Altbausanierung, durch moderne und leistungsfähige Verkabelungssysteme ersetzt wurden. Hinzu kam eine Anbindung an das Internet und dementsprechend eine starke Zunahme der Nutzung der Internetdienste sowie des Institutes im weltweiten Internet. Damit einher geht natürlich auch eine verstärkte Bedrohung der Daten des Instituts mit der Konsequenz der Planung und Umsetzung von Gegenmaßnahmen. Eine starke Zunahme ist auch bei zentralen, computergesteuerten Anlagen zu erkennen. So erfolgt beispielsweise die datentechnische Regelung der Phytokammern und Gewächshäuser computergesteuert. Ein zentrales EDV-gesteuertes Zeiterfassungssystem kam ebenso hinzu, wie eine zentrale Überwachung wichtiger Systeme des Institutes über eine zentrale Gebäude- und Leittechnik. Bei auftretenden Havarien erfolgt hier eine automatische Alarmierung der zuständigen Mitarbeiter per SMS. Hinzu kamen die Einführung immer neuer IT-Verfahren, wie es die Systeme der Buchhaltung, der Personalverwaltung, sowie Datenbanksysteme zur Speicherung wissenschaftlicher Daten in einer Datenbank (ACD) und ein System der Chemikalienlagerverwaltung (Claks) darstellen, mit entsprechendem Schulungs- und Betreuungsaufwand. Die größte Zunahme liegt allerdings heute im Wartungsaufwand für die peripheren Geräte wie APC, Drucker und Scanner. Entsprechend breit gefächert sind die Aufgaben des IT-Personals. Im Wesentlichen liegen sie in folgenden Punkten:

- Strategie und Umsetzungsplanung zur Entwicklung der IuKT Infrastruktur,
- Fortschreibung des IuKT Rahmenkonzeptes.
- Sicherheitsanalyse, Planung und Umsetzung von Sicherheitsstrategien,

- IuKT-Beschaffung,
- Einrichtung und Bereithaltung der IuKT-Infrastruktur sowie der Standard- und Individualsoftware,
- Datensicherung- und Archivierung,
- Anwendungsentwicklung und –pflege,
- Anwenderbetreuung und –beratung,
- Reparatur und Wartung,
- Lehrlingsausbildung,
- Betreuung von Praktikanten.

Für die Bewältigung dieser Aufgaben stehen dem Institut zwei Netzwerkadministratoren als Vollzeitkräfte in der Arbeitsgruppe Gerätetechnik / EDV sowie ein Mitarbeiter in der Abteilung Natur- und Wirkstoffchemie, welcher neben administrativen Aufgaben auch wissenschaftliche Fragestellungen bearbeitet, zur Verfügung.

4. Schlussbemerkungen

Mit der vorliegenden Konzeption sowie den bereits im Institut eingeführten und praktizierten Standards existiert eine solide Perspektive für die Realisierung der Forschungsvorhaben und für eine größtmögliche Unterstützung aller Mitarbeiter im Rahmen der vorhandenen personellen und monetären Ressourcen und in Übereinstimmung mit den Forderungen und Empfehlungen des BMI sowie des BRH.

Wir kommen damit auch dem Anforderungsprofil nach, das die DFG als generelle Leitlinie für dezentrale Versorgungssysteme bei ihren Zuwendungsempfängern im Drittmittelbereich aufgestellt hat:

- Durchlässigkeit der Systemfunktionen beim Zusammenwirken mit anderen Systemen in heterogenen Umgebungen,
- Verwendung so genannter "offener Systeme", also solcher mit herstellerneutralen, möglichst standardisierten Betriebssystemen, Programmschnittstellen und Bedienoberflächen,
- Aufgabenbezogenheit, Benutzerfreundlichkeit, kurze Reaktionszeiten, angemessener Durchsatz sowie aufgabengemäße Benutzerführung,
- Technische Zuverlässigkeit und Ausfallsicherheit der Systeme und Dienste,
- Schutz der Daten und Programme gegen unberechtigten Zugriff und gegen Zerstörung,
- Umsetzung einer Forderung der guten wissenschaftlichen Praxis durch sichere Archivierung der wissenschaftlichen Daten über einen Zeitraum von mindestens zehn Jahren.

Die Aufrechterhaltung und Verbesserung der IT-Infrastruktur, der Sicherheit und der verfügbaren Dienste im Kontext der wirtschaftlichen Rahmenbedingungen des Institutes einerseits und der wissenschaftlichen Aufgabenstellung sowie der sich daraus ergebenden Anforderungen an die IT andererseits ist eine Herausforderung, die das IT-Personal in enger und vertrauensvoller Zusammenarbeit mit dem Direktorium meistern wird. Der Bedeutung von Weiterbildung und Erfahrungsaustausch mit den anderen Instituten der WGL im Rahmen des EDV Arbeitskreises der WGL wird dabei vom IT-Personal ebenso wie von der Institutsleitung Rechnung getragen.

Nach Beschlussfassung durch das Direktorium am 10.07.2006 tritt das Rahmenkonzept zum Einsatz der Informations- und Kommunikationstechniken mit sofortiger Wirkung in Kraft.

Halle (Saale), 22.08.2006

Prof. Dr. Dierk Scheel
Geschäftsführender Direktor

Lothar Franzen
Administrativer Leiter