CECAM (Centre Européen de Calcul Atomique et Moléculaire)
Relazione sulle attività - Anno 2018

Filippo De Angelis

1. Introduzione

Il CECAM (Centre Européen de Calcul Atomique et Moléculaire, http://www.cecam.org/) è un'organizzazione Europea che promuove la ricerca di frontiera nell'ambito delle scienze computazionali dedicate alla simulazione atomistica e molecolare applicata alla fisica ed alla chimica della materia condensata, alla scienza dei materiali ed alla chimica biologica e medica. Il CECAM è organizzato in un quartiere generale, sito presso l'EPFL di Losanna, Svizzera, e di 18 nodi distribuiti tra i vari paesi aderenti. Di seguito viene presentato l'elenco dei nodi con i relativi paesi di afferenza:

- **CECAM-AT**
- **CECAM-FI**
- **CECAM-FR-MOSER**
- **CECAM-FR-RA**
- **CECAM-FR-GSO**
- **CECAM-DE-MM1P**
- **CECAM-DE-JUELICH**
- **CECAM-DE-MMS**
- **CECAM-DE-SMSM**
- **CECAM-IRL**
- **CECAM-ISR**
- **CECAM-IT-SIDE**
- **CECAM-IT-SMART**
- **CECAM-IT-SIMUL**
- **CECAM-NL**
- **CECAM-ES**
- **CECAM-UK-HARTREE**
- **CECAM-UK-JCMAXWELL**

Di seguito si riporta l'elenco delle Istituzioni partecipanti.

Austria	**CMS** (Center for Computational Materials Science)
Belgium	**F.R.S.-FNRS** (Fonds de la Recherche Scientifique) **FWO** (Fonds Wetenschappelijk Onderzoek-Vlaanderen)
Finland	**Aalto University**
France	**CEA** (Commissariat á l'Energie Atomique) **CNRS** (Centre National de la Recherche Scientifique)
Germany	**DFG** (Deutsche Forschungsgemeinschaft) **MPG** (Max Planck Gesellschaft) **FZJ** (Forschungszentrum Jülich GmbH)
Ireland	**IUA** (Irish Universities Association)
Israel	**TAU** (Tel Aviv University)
Italy	**CNR** (Consiglio Nazionale delle Ricerche) **IIT** (Italian Institute of Technology) **SISSA** (Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati) **SNS** (Scuola Normale Superiore) **UNIBO+CINECA** (University of Bologna and the Italian Supercomputer Center)
Slovenia	**NIC + UL FMF** (National Institute of Chemistry and University of Ljubljana)
Spain	**MINECO** (Ministerio de Ciencia e Innovación)
Sweden	**Uppsala University**
Switzerland	**EPFL** (Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne) **FNS-SNF** (Fonds National Suisse de la Recherche Scientifique; Schweizerischer Nationalfonds zur Förderung der wissenschaftlichen Forschung)
The Netherlands	**NWO** (The Nederlandse Organisatie voor Wetenschappelijk Onderzoek) **UvA** (Universiteit van Amsterdam)
United Kingdom	**UKRI STFC** (Science and Technology Facilities Council) **UKRI EPSRC** (Engineering and Physical Sciences Research Council)

2. Attività significative per l'Italia e per il CNR svolte nel 2018 dall'Organismo di cui si è Rappresentante

L'Italia partecipa al CECAM Council con cinque Istituzioni. L'Italia è di fatto il paese con il maggior numero di Istituzioni nel CECAM Council.

Le attività del CECAM si esplicano tramite le azioni scientifiche dei nodi ed attraverso l'organizzazione di workshop, scuole e conferenze internazionali, per i quali il CECAM offre un sostegno medio di ~12.000 euro ad evento, oltre che sostegno logistico ed organizzativo (segreteria, pagine web, gestione contatti, prenotazione hotel, etc.).

Nel 2018 è stato organizzato un numero molto elevato di scuole (19) e workshop (46), di cui 3 hanno visto l'organizzazione da parte di ricercatori e ricercatrici CNR, si veda Appendice A.

Per il 2019 sono in programma o sono già stati effettuati svariati workshops, di cui molti vedono ricercatori e ricercatrici Italiani tra gli organizzatori. Numerosi sono inoltre i ricercatori CNR anche tra gli invited speaker e i partecipanti alle iniziative CECAM.

3. Attività svolte come Rappresentante nel 2018 all'interno dell'Organismo e indicazioni circa le ricadute sulla comunità scientifica nazionale

Durante il 2018 come rappresentante CNR ho partecipato al CECAM Council Meeting generale, tenutosi presso la sede di Losanna a Novembre 2018.

Durante il meeting si sono discusse le linee finanziarie per il 2019-2020 e si sono valutate le attività svolte nel 2018. E' stata inoltra proposta una variazione allo statuto del CECAM, al fine di favorire attività esercitate da ricercatori appartenenti a stati non Europei, che è stato approvato nel corso del 2019.

Si è recentemente chiusa la call for workshop proposals per il 2020. Per favorire la più ampia partecipazione possibile da parte del personale CNR, sono stati inviati diversi messaggi alla comunità scientifica, offrendo informazioni e sostegno alle proposte.

4. Valutazione della partecipazione alla Union in rapporto ai benefici e ai costi della membership

La presenza CNR nel CECAM è fondamentale per mantenere e rinforzare il peso dell'Italia nella comunità computazionale Europea, che di fatto si identifica largamente nel CECAM come principale organismo organizzativo e di rappresentanza. Da un punto di vista strettamente costo/beneficio, il supporto all'organizzazione degli eventi eccede sicuramente l'ammontare della fee pagata. E' quindi ovvio come i benefici anche solo economici nell'accesso a fondi siano nettamente in favore del personale CNR. Sostenendo il CECAM il CNR ha l'opportunità di rinforzare ulteriormente il peso dell'Ente nel calcolo scientifico e nella simulazione, lanciando iniziative in settori di interesse all'interfaccia tra fisica, scienza dei materiali, chimica nonché chimica biologica e medica. Tali attività sono ampiamente riconosciute a livello Europeo e molte call for proposals nel programma H2020 sono inerenti alle scienze computazionali, al modelling ed alla simulazione. Recentemente il CECAM ha coordinato la presentazione di iniziative Europee che hanno attratto considerevoli finanziamenti, quali ad esempio il progetto E-CAM. Questo progetto, finanziato in H2020, si prefigge la creazione di una infrastruttura elettronica (e-infrastructure) dedicata allo sviluppo di software, alla formazione ed alla consulenza nell'ambito del modelling e della simulazione. La partecipazione CNR al CECAM può anche rappresentare un'opportunità di accesso ai finanziamenti Europei altrimenti difficilmente accessibili al singolo ricercatore/ricercatrice operante nel campo del modeling e della simulazione.

5. Valutazioni sulla partecipazione italiana con proposte per migliorare l'interesse e il coinvolgimento

Si è riscontrata una generale riluttanza da parte del personale CNR non precedentemente coinvolto in iniziative CECAM a presentare domande per workshop finanziati dal CECAM, nonostante l'ampia pubblicizzazione attraverso canali istituzionali e contatti personali ad opera del sottoscritto. Ritengo personalmente molto importante valorizzare tale opportunità inserendo link alla call for proposals nei siti web dei Dipartimenti del CNR e nel sito Istituzionale dell'Ente.

6. Esperti italiani con ruoli apicali nominati nell'ambito dell'Organismo o in Commissioni e Programmi correlati (di cui si è a conoscenza))

Il vice-direttore del CECAM è la Dr. Sara Bonella, proveniente dall'Università di Roma La Sapienza.

Il presidente del CECAM è il Prof. Alessandro Laio, della SISSA e associato CNR-DEMOCRITOS.

7. Se Organismo con Italian Committee, breve sunto delle attività 2018 della Commissione CNR

N/A

8. Note (se necessario)

N/A

9. Conclusioni

Il CECAM si pone come referente Europeo nelle attività di modeling e simulazione computazionale, riconosciute nelle maggiori call H2020 come centrali allo sviluppo scientifico e tecnologico. La partecipazione del CNR al CECAM è strategica sia in quanto permette al personale dell'Ente di essere rappresentato nelle sedi decisionali, sia per avere accesso a finanziamenti per organizzazione di workshop. L'Italia è il paese con il maggior numero di istituzioni membri, potendo quindi esercitare una sinergia favorevole al sistema della ricerca italiana. Si sostiene pienamente la prosecuzione della partecipazione CNR al CECAM.

Perugia, 06/08/2019

Appendice A

Partecipazione di ricercatori CNR come organizzatori di attività CECAM 2018 - Workshops

Emerging Technologies in Scientific Data Visualisation

April 3 to April 6 - IT-SISSA-SNS, Trieste, Italy

Emine Kucukbenli[1], Giordano Mancini[2], Stefano de Gironcoli[1,3]

[1] International School for Advanced Studies, Trieste, Italy
[2] Scuola Normale Superiore, Pisa, Italy
[3] CNR-DEMOCRITOS IOM, Trieste, Italy

Frontiers and Challenges of Computing Metals for Biochemical, Medical and Technological Applications

July 11 to July 13 - FR-MOSER, Chimie ParisTech, Paris, France

Alessandra Magistrato[1], Marco De Vivo[2], Gianluca Lattanzi[3], Carlo Adamo[4], Giulia Palermo[5], Ursula Röthlisberger[6]

[1] CNR-IOM@SISSA, Trieste, Italy
[2] Italian Institute of Technology, Genova, Italy
[3] University of Trento, Italy
[4] Ecole Nationale Superieure de Chimie de Paris, France
[5] University of California San Diego, USA
[6] Swiss Federal Institute of Technology Lausanne (EPFL), Switzerland

Excitonic Insulator: New Perspectives in Long-range Interacting Systems

September 3 to September 5 - CECAM-HQ-EPFL, Lausanne, Switzerland

Massimo Rontani[1], Elisa Molinari[1,2]

[1] CNR-NANO Modena, Italy
[2] University of Modena and Reggio Emilia, Italy