

CECAM (Centre Européen de Calcul Atomique et Moléculaire)

Relazione sulle attività - Anno 2023

Mauro Stener e Giovanni Barcaro

1. Introduzione

Il CECAM (Centre Européen de Calcul Atomique et Moléculaire, <http://www.cecaml.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 appartenenza, si segnala, in particolare, il nuovo nodo US-CENTRAL a Chicago (USA):

- [CECAM-AT](#)
- [CECAM-DE-JUELICH](#)
- [CECAM-DE-MM1P](#)
- [CECAM-DE-MMS](#)
- [CECAM-DE-SMSM](#)
- [CECAM-ES](#)
- [CECAM-FI](#)
- [CECAM-FR-GSO](#)
- [CECAM-FR-MOSER](#)
- [CECAM-FR-RA](#)
- [CECAM-IRL](#)
- [CECAM-ISR](#)
- [CECAM-IT-SIMUL](#)
- [CECAM-IT-SISSA-SNS](#)
- [CECAM-NL](#)
- [CECAM-UK-DARESBUY](#)
- [CECAM-UK-JCMAXWELL](#)
- [CECAM-US-CENTRAL](#)

Di seguito si riporta l'elenco delle Istituzioni partecipanti:

	CMS Center for Computational Materials Science Austria		FRS-FNRS Fonds de la Recherche Scientifique Belgium
	FWO Fonds Wetenschappelijk Onderzoek-Vlaanderen Belgium		IoP+CSRC Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences and Beijing Computational Science Research Center China
	Aalto University Finland		CEA Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives France
	CNRS Centre National de la Recherche Scientifique France		DFG Deutsche Forschungsgemeinschaft Germany
	MPG Max Planck Gesellschaft Germany		FZJ Forschungszentrum Jülich GmbH Germany
	IUA Irish Universities Association Ireland		TAU Tel Aviv University Israel
	CNR Consiglio Nazionale delle Ricerche Italy		IIT Italian Institute of Technology Italy
	SISSA Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati Italy		SNS Scuola Normale Superiore Italy
	UNIBO+CINECA University of Bologna and the Italian Supercomputer Center Italy		NIC Norwegian Icelandic Consortium Norway-Iceland
	SLING Slovenian National Supercomputing Network Slovenia		MINECO Ministerio de Ciencia e Innovación Spain
	Uppsala University Sweden		EPFL Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne Switzerland
	FNS-SNF Fonds National Suisse de la Recherche Scientifique Switzerland		NWO The Nederlandse Organisatie voor Wetenschappelijk Onderzoek The Netherlands
	UKRI STFC Science and Technology Facilities Council United Kingdom		UKRI EPSRC Engineering and Physical Sciences Research Council United Kingdom
	UChicago The University of Chicago United States		

2. Attività significative per l'Italia e per il CNR svolte nel 2023 dall'Organismo di cui si è Rappresentante

L'Italia partecipa al CECAM Council con cinque Istituzioni (CNR, SNS, SISSA, IIT e CINECA/UniBO) . 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 2023 sono stati organizzati 38 workshop, di cui 13 organizzati da ricercatori di istituzioni italiane e di cui 2 hanno visto l'organizzazione da parte di ricercatori e ricercatrici CNR, si veda Appendice A.

Per il 2024 sono in programma 53 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 2023 all'interno dell'Organismo e indicazioni circa le ricadute sulla comunità scientifica nazionale

Durante il 2023 come rappresentante CNR (MS) ho partecipato di persona al CECAM Council Meeting generale, tenutosi presso la sede di Losanna a Novembre 2023.

Durante il meeting si sono discusse le linee finanziarie per il 2024 e si sono valutate le attività svolte nel 2022. In particolare sono state valutate e approvate nuove adesioni al CECAM da parte di 1) un consorzio tra Norvegia e Islanda, 2) Academia Sinica di Taiwan.

Inoltre è imminente la scadenza delle convenzioni tra le varie istituzioni che aderiscono al CECAM e il CECAM stesso, tra cui il CNR. Per cui a breve il CNR riceverà da parte del CECAM una richiesta formale di rinnovo della convenzione. E' opportuno che il CNR inizi quanto prima le opportune azioni per rinnovare tale convenzione che, come risulta dalla sezione successive, è estremamente vantaggiosa per la tutta la comunità scientifica interessata al calcolo scientifico.

4. Valutazione della partecipazione del CNR nel CECAM 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 organism organizzativo e di rappresentanza. Da un punto di vista strettamente costo/beneficio, il support all'organizzazione degli eventi eccede sicuramente l'ammontare della fee pagata. È 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 modeling ed alla simulazione. Recentemente il

CECAM ha coordinato la presentazione di iniziative Europee che hanno attratto considerevoli finanziamenti. 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

Negli ultimi anni si è osservato un maggiore coinvolgimento da parte del personale CNR a presentare domande per workshop finanziati dal CECAM. Sarebbe opportuno 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 direttore del CECAM è il Prof. Andea Cavalli, professore ordinario di chimica farmaceutica presso l'Università di Bologna. Il vice-direttore del CECAM è la Dr.ssa Sara Bonella, proveniente dall'Università di Roma La Sapienza.

7. 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.

Mauro Stener,

Firma

Trieste, 8 marzo 2024

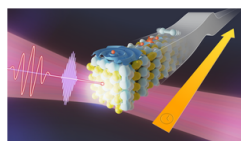
Giovanni Barcaro

Firma

Pisa, 8 marzo 2024

Appendice A

Partecipazione di ricercatori e ricercatrici CNR come organizzatori di attività CECAM 2024



Type

Flagship Workshop

Hosting node

CECAM-HQ

September 26, 2023 – September 29, 2023

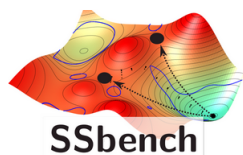
ATTO2NANO: MODELING ULTRAFAST DYNAMICS ACROSS TIME-SCALES IN CONDENSED MATTER

Location

CECAM-HQ-EPFL, Lausanne, Switzerland

Organizer

Fabio Caruso (University of Kiel),
Umberto De Giovannini (Università di Palermo),
Alejandro Molina Sanchez (University of Valencia),
Sivan Refaely-Abramson (Weizmann Institute of Science),
Davide Sangalli (Istituto di Struttura della Materia (ISM - CNR))



Type

Flagship Workshop

Hosting node

CECAM-FR-GSO

June 27, 2023 – June 29, 2023

SADDLE POINT SEARCH ALGORITHMS: TOWARDS THE DEFINITION OF A COMMON BENCHMARK FRAMEWORK

Location

CECAM-FR-GSO LAAS-CNRS, 7 avenue du Colonel Roche, Toulouse, France

Organizer

Miha Gunde (Institute Rudjer Boskovic),
Anne Hemeryck (LAAS-CNRS),
Matic Poberznik (CNR-IOM, Istituto Officina Dei Materiali)