

CECAM (Centre Européen de Calcul Atomique et Moléculaire)

Relazione sulle attività - Anno 2024

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 21 nodi distribuiti tra i vari paesi aderenti. Di seguito viene presentato l'elenco dei nodi con i relativi paesi di afferenza, si segnalano, in particolare, il tre nuovi nodi: CN a Pechino (Cina), TW a Taipei (Taiwan) e US-WEST a Berkeley (SA).

- [CECAM-AT](#)
- [CECAM-CN](#)
- [CECAM-DE-JUELICH](#)
- [CECAM-DE-MMS](#)
- [CECAM-DE-QMDYN](#)
- [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-TW](#)
- [CECAM-UK-DARESURY](#)
- [CECAM-UK-JCMAXWELL](#)
- [CECAM-US-CENTRAL](#)
- [CECAM-US-WEST](#)

Di seguito si riporta l'elenco delle Istituzioni partecipanti:



CMS
Center for Computational Materials Science
Austria



FWO
Fonds Wetenschappelijk Onderzoek-Vlaanderen
Belgium



Aalto University
Finland



CNRS
Centre National de la Recherche Scientifique
France



MPG
Max Planck Gesellschaft
Germany



IUA
Irish Universities Association
Ireland



CNR
Consiglio Nazionale delle Ricerche
Italy



SISSA
Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati
Italy



UNIBO+CINECA
University of Bologna and the Italian Supercomputer Center Italy



SLING
Slovenian National Supercomputing Network
Slovenia



Uppsala University
Sweden



FNS-SNF
Fonds National Suisse de la Recherche Scientifique
Switzerland



UKRI STFC
Science and Technology Facilities Council
United Kingdom



UChicago
The University of Chicago
United Kingdom



FRS-FNRS
Fonds de la Recherche Scientifique
Belgium



IoP+CSRC
Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences and Beijing
Computational Science Research Center
China



CEA
Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives
France



DFG
Deutsche Forschungsgemeinschaft
Germany



FZJ
Forschungszentrum Jülich GmbH
Germany



TAU
Tel Aviv University
Israel



IIT
Italian Institute of Technology
Italy



SNS
Scuola Normale Superiore
Italy



NIC
Norwegian Icelandic Consortium
Norway-Iceland



MINECO
Ministerio de Ciencia e Innovación
Spain



EPFL
Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne
Switzerland



NWO
The Nederlandse Organisatie voor Wetenschappelijk Onderzoek
The Netherlands



UKRI EPSRC
Engineering and Physical Sciences Research Council
United Kingdom

UC Berkeley



中央研究院
ACADEMIA SINICA

2. Attività significative per l'Italia e per il CNR svolte nel 2024 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 2024 sono stati organizzati **52** workshop (38 nel 2023), di cui **20** organizzati da ricercatori di istituzioni italiane (13 nel 2023) e di cui **4** hanno visto l'organizzazione da parte di ricercatori e ricercatrici CNR (2 nel 2023), si veda Appendice A.

Per il 2025 sono in programma **55** 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 2024 all'interno dell'Organismo e indicazioni circa le ricadute sulla comunità scientifica nazionale

In occasione della riunione annuale del CECAM, tenutasi a Losanna alla sede centrale (HQ) presso EPFL nei giorni 14 e 15 novembre 2024, il CNR è stato rappresentato con uno dei suoi delegati. Durante la riunione, i seguenti punti sono stati discussi:

- voto di estensione a Stefan Blügel come Presidente di CECAM e al Prof. Cavalli come Direttore;
- report delle attività scientifiche portate avanti da CECAM durante l'ultimo anno in termini di Workshop e Scuole, tenutesi sia presso l'HQ sia nei nodi dislocati in numerosi paesi sia europei che extra-europei;
- report finanziario dell'anno 2024 e preventivo del report finanziario per l'anno 2025;
- discussione delle proposte dei progetti inviati per il finanziamento sia presso l'HQ che presso i nodi;
- lettura della bozza di nuovo contratto di agreement fra CECAM e membri affiliati al fine della stipula della nuova convenzione;
- revisione della composizione del Scientific Advisory Board (SAC), responsabile della valutazione scientifica di HQ e Nodi;
- Esposizione delle Scientific Initiatives portate avanti dall'Executive Board di CECAM per promuovere le attività del Consiglio e stimolare la candidatura di workshop e scuole.

La necessità di finalizzare la nuova convenzione fra CECAM e membri affiliati ha reso necessaria una successiva riunione il giorno 16 Aprile 2025, alla quale uno dei delegati del CNR ha partecipato in modalità on-line. Tale riunione ha portato alla finalizzazione della bozza della nuova convenzione, la quale è stata inoltrata all'Ufficio legale dell'Ente, il quale non ha avanzato modifiche di sorta.

Il testo definitivo della convenzione è stato infine inoltrato agli Uffici competenti dell'Ente in data 27 Maggio 2025 per la firma definitiva.

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 organismo 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 ulteriormente tale opportunità inserendo link alle "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, 11 settembre 2025

Giovanni Barcaro

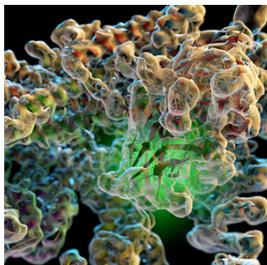


Firma

Pisa, 11 settembre 2025

Appendice A

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



October 21, 2024 – October 24, 2024

EMERGING THEORETICAL APPROACHES TO COMPLEMENT SINGLE-PARTICLE CRYO-ELECTRON MICROSCOPY

Type

Flagship Workshop

Hosting node

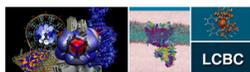
CECAM-IT-SISSA-SNS

Location

CECAM-IT-SISSA-SNS

Organizer

Rommie Amaro (University of California, San Diego),
Gabriel Lander (Scripps Research),
Alessandra Magistrato (CNR-IOM@SISSA),
Giulia Palermo (University of California Riverside),
Joanna Trylska (University of Warsaw)



October 1, 2024 – October 3, 2024

COMPUTATIONAL CHEMISTRY ACROSS SCALES AND DISCIPLINES: CELEBRATING THE 60TH BIRTHDAY OF URSULA RÖTHLISBERGER

Type

Flagship Workshop

Hosting node

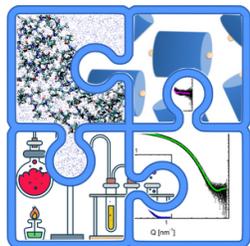
CECAM-HQ

Location

CECAM-HQ-EPFL, room BCH2103, Batochime building, Lausanne, Switzerland

Organizer

Paolo Carloni (Forschungszentrum Jülich and RWTH Aachen University, Germany),
Michele Cascella (University of Oslo),
Alessandra Magistrato (CNR-IOM@SISSA),
Ute Roehrig (SIB Swiss Institute of Bioinformatics),
Stefano Vanni (University of Fribourg)



September 4, 2024 – September 7, 2024

EXPLORING BIO-INSPIRED SYSTEMS: A SYNERGY BETWEEN MULTISCALE EXPERIMENTAL AND COMPUTATIONAL APPROACHES

Type

Flagship Workshop

Hosting node

CECAM-AT

Location

CECAM-AT

Organizer

Emanuela Bianchi (Technische Universität Wien),
Barbara Capone (Roma Tre University),
Lucia COMEZ (CNR-IOM),
Cristiano De Michele ("Sapienza" University of Rome),
Sara Del Galdo (Roma Tre University),
Laura Lupi (Università Roma Tre)



February 19, 2024 – February 24, 2024

ELECTRONIC STRUCTURE SOFTWARE DEVELOPMENT: ADVANCING THE MODULAR PARADIGM

Type

Flagship Workshop

Hosting node

CECAM-HQ

Location

CECAM-HQ-EPFL, Lausanne, Switzerland

Organizer

Emilio Artacho (Nanogune, Ikerbasque and University of Cambridge),

Volker Blum (Duke University),

Damien Caliste (CEA),

Alin Elena (Daresbury Laboratory),

Alberto Garcia (Institut de Ciencia de Materials de Barcelona (ICMAB-CSIC)),

Martin Lueders (Max Planck Institute for the Structure and Dynamics of Matter),

Layla Martin-Samos (CNR-IOM Democritos National Simulation Center, Trieste),