

CECAM (Centre Européen de Calcul Atomique et Moléculaire)

Relazione sulle attività - Anno 2017

Filippo De Angelis

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:

- [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](#)

Per l'Italia i nodi sono SIMUL-Istituto Italiano di Tecnologia (IIT), SMART - Scuola Normale Superiore (SNS), e SIDE - Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati (SISSA).

2. Attività significative per l'Italia e per il CNR svolte nel 2016 dall'Organismo di cui si è Rappresentante

L'Italia partecipa al CECAM Council con quattro Istituzioni, in aggiunta al CINECA/Università di Bologna dal council di Novembre 2017. IIT, SNS e SISSA. 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 2017 è stato organizzato un numero molto elevato di workshop, di cui 3 hanno visto l'organizzazione da parte di ricercatori e ricercatrici CNR, si veda Appendice A. Nel 2017 sono state inoltre organizzate 3 Scuole da ricercatori CNR ed 1 conferenza, Appendice A.

Per il 2018 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 2017 all'interno dell'Organismo e indicazioni circa le ricadute sulla comunità scientifica nazionale

Durante il 2017 come rappresentante CNR ho partecipato al CECAM Council Meeting generale, tenutosi presso la sede di Losanna a Novembre 2017.

Durante il meeting si sono discusse le linee finanziarie per il 2018-2019 e si sono valutate le attività svolte nel 2017. Dal 2018 il CNR paga una fee di partecipazione di 30.000 euro, in linea con quella delle altre Istituzioni partecipanti, a seguito dell'operazione di revisione della spesa portata a compimento dal sottoscritto nell'anno passato.

Attualmente è aperta la call for workshop proposals per il 2019, <http://www.cecarn.org/submitting.html>. 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 di 7 eventi (3 workshop, 3 scuole e 1 conferenza) 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.

Il presidente uscente del CECAM è il Prof. Christoph Dellago, dell'Università di Vienna.

7. Se Organismo con Italian Committee, breve sunto delle attività 2017 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. Con l'ingresso di un nuovo partner italiano nel 2017, l'Italia sarà 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.

Firma

A handwritten signature in blue ink, appearing to be 'G. M. J.', is written on the right side of the page.

Perugia, 15/05/2018

Appendice A

Partecipazione di ricercatori Italiani alle attività CECAM 2017 (in evidenza gli organizzatori CNR)

Conferenze 2017

Conferences 2017

1) Ab initio Spin-orbitronics

Location : The conference will take place at Hotel Promenade in Montesilvano, Pescara (Italy)
September 25, 2017 - September 29, 2017

- Silvia Picozzi
Consiglio Nazionale delle Ricerche CNR-SPIN, Chieti, Italy
- Stefan Blügel
Forschungszentrum Jülich, Germany
- Ingrid Mertig
Martin Luther University Halle, Germany

Workshops 2017

1) Recent Advances on the Glass and Jamming Transitions

Location : CECAM-HQ-EPFL, Lausanne, Switzerland
January 9, 2017 - January 11, 2017

- Patrick Charbonneau
Department of Chemistry, Duke University , USA
- Ludovic Berthier
Laboratoire Charles Coulomb UMR 5221 CNRS - Université de Montpellier, France
- Francesco Zamponi
LPT, ENS Paris, France

2) 2nd NOMAD (Novel Materials Discovery) Industry Workshop

Location : Hamburg
February 6, 2017 - February 7, 2017

- Alessandro De Vita
King's College London and University of Trieste, United Kingdom
- Matthias Scheffler
Fritz Haber Institute of the Max Planck Society (FHI), Berlin, Germany
- Angel Rubio
Max Planck Institute for the Structure and Dynamics of Matter, Germany

3) Challenges across Large-Scale Biomolecular and Polymer Simulations

Location : CECAM-AT
February 21, 2017 - February 24, 2017

- Ivan Coluzza
Center for Cooperative Research in Biomaterials, Spain
- Samuela Pasquali
Paris Descartes University, France
- Barbara Capone
Università degli Studi Roma Tre, Italy
- Christoph Dellago
University of Vienna, Austria
- Tamar Schlick
New York University, USA

4) Ion Transport from Physics to Physiology: the Missing Rungs in the Ladder

Location : CECAM-HQ-EPFL, Lausanne, Switzerland

April 3, 2017 - April 5, 2017

- Lucie Delemotte
KTH Science for Life Laboratory, Sweden
- Vincenzo Carnevale
Temple University - Philadelphia, USA
- Rebecca Howard
Stockholm University, Sweden
- Ute Hellmich
Johannes Gutenberg-Universität Mainz , Germany
- Brad Rothberg
Temple University School of Medicine, USA

5) Recent advances in numerical methods for micro and macro models in fluid dynamics

Location : CECAM-IT-SIMUL

April 5, 2017 - April 7, 2017

- Maurizio Falcone
Università di Roma "La Sapienza", Italy
- Giovanni Ciccotti
University of Rome La Sapienza, Italy
- Simona Perotto
Politecnico di Milano, Italy
- Gianluigi Rozza
SISSA, Trieste, Italy

6) Cell and tissue motility

Location : CECAM-HQ-EPFL, Lausanne, Switzerland

May 3, 2017 - May 5, 2017

- Luca Giomi
Lorentz Institute, Netherlands, The Netherlands
- Julia Yeomans
Oxford University, United Kingdom
- Benoit Ladoux
CNRS and Paris Diderot University, France

7) Theoretical Chemistry for Extended Systems: systematically improvable electronic structure methods

Location : CECAM-FR-GSO

May 22, 2017 - May 24, 2017

- Arjan Berger
University Paul Sabatier, France
- Michel Caffarel
University Paul Sabatier, Toulouse, France
- Thierry Leininger
Laboratoire de Chimie et Physique Quantiques UMR5626 CNRS Université Toulouse 3, France
- Dirk Andrae
Physikalische und Theoretische Chemie - Institut für Chemie und Biochemie - Freie Universität Berlin, Germany
- Stefano Evangelisti
Universite Paul Sabatier, France

8) Green's function methods: the next generation III

Location : CECAM-FR-GSO

June 6, 2017 - June 9, 2017

- Pina Romaniello
University Paul Sabatier, France
- Arjan Berger

- University Paul Sabatier, France
- Francesco Sottile
Ecole Polytechnique, Palaiseau, France

9) The future of biomembrane simulations: hidden pitfalls and future challenges

Location : CECAM-FR-RA

June 6, 2017 - June 9, 2017

- Markus Deserno
Carnegie Mellon University, Pittsburgh, PA, USA
- Claire Loison
Institut Lumière Matière, France
- Luca Monticelli
CNRS, University of Lyon, France
- Stefano Vanni
University of Fribourg, Switzerland

10) Seeking synergy between dynamics and statistics for non-equilibrium quantum processes

Location : ENS Paris

June 6, 2017 - June 9, 2017

- Federica Agostini
Université Paris-Sud, Laboratoire de Chimie Physique, France
- David Coker
Boston University, USA
- David Lauvergnat
Université Paris-Sud, Laboratoire de Chimie Physique, France
- Aaron Kelly
Dalhousie University, Canada

11) Bridging the worlds of electromagnetic and quantum simulations

Location : CECAM-ISR

June 20, 2017 - June 23, 2017

- Amir Boag
Tel Aviv University, Israel
- Vitaliy Lomakin
University of California, San Diego, USA
- Stefano Maci
University of Siena, Italy
- Shanker Balasubramaniam
Michigan State University, USA
- Oded Hod
Tel Aviv University, Israel
- Amir Natan
Tel Aviv University, Israel

12) Rheology of gel networks: combining experimental, computational and theoretical insights

Location : CECAM-FR-RA, CBP in Lyon, France

June 21, 2017 - June 23, 2017

- Kirsten Martens
LIPhy, University Grenoble Alpes & CNRS, France
- Emanuela Del Gado
Georgetown University, USA
- Sebastien Manneville
ENS Lyon, France
- Veronique Trappe
University of Fribourg, Switzerland
- Beatrice Ruta
University Lyon 1 & CNRS, France

13) Challenges in reaction dynamics of gas-surface interactions and methodological advances in dissipative and non-adiabatic processes

Location : CECAM-FR-GSO

June 26, 2017 - June 29, 2017

- Fernand SPIEGELMAN
LCPQ/IRSAMC, CNRS and Université Toulouse III Paul Sabatier, France
- Didier LEMOINE
LCAR/IRSAMC, CNRS and Université Toulouse III Paul Sabatier, France
- Bret JACKSON
Department of Chemistry, University of Massachusetts, Amherst, USA
- Rocco MARTINAZZO
Department of Chemistry, University of Milan, Italy

14) Electronic Structure Library coding workshop: drivers

Location : CECAM-IT-SIDE

July 10, 2017 - July 21, 2017

- Stefano de Gironcoli
International School for Advanced Studies (SISSA) and CNR-DEMOCRITOS IOM, Trieste, Italy
- Ivan Girotto
International Center for theoretical Physics, Italy
- Fabiano Corsetti
Synopsys QuantumWise, Denmark

15) ESDW6: Classical MD

Location : CECAM-NL

August 14, 2017 - August 25, 2017

- Peter Bolhuis
University of Amsterdam, The Netherlands
- Christoph Dellago
University of Vienna, Austria
- David Swenson
Universiteit van Amsterdam, The Netherlands

16) Synergy between quantum computing and high-performance computing

Location : CECAM-ETHZ, Zurich, Switzerland

August 22, 2017 - August 24, 2017

- Rosa Di Felice
CNR Institute of Nanoscience, Modena, Italy
- Elisa Molinari
University of Modena and Reggio Emilia & CNR-NANO, Modena, Italy
- Sara Bonella
CECAM@EPFL, Switzerland
- Ivano Tavernelli
IBM-Zurich Research, Switzerland
- Daniel Lidar
USC, USA
- Seth Lloyd
Massachusetts Institute of Technology, USA
- Matthias Troyer
Swiss Federal Institute of Technology Zurich (ETHZ), Switzerland

17) Addressing metastability in interfacial phenomena across multiple time and length scales

Location : CECAM-HQ-EPFL, Lausanne, Switzerland

August 29, 2017 - September 1, 2017

- Simone Meloni

Sapienza University of Rome, Italy

- Alberto Giacomello
Sapienza University of Rome, Italy
- Halim Kusumaatmaja
Durham University, United Kingdom

18) Big-Data driven Materials Science

Location : CECAM-HQ-EPFL, Lausanne, Switzerland

September 11, 2017 - September 13, 2017

- Luca M. Ghiringhelli
Fritz Haber Institute of the Max Planck Society (FHI), Berlin , Germany
- Matthias Scheffler
Fritz Haber Institute of the Max Planck Society (FHI), Berlin, Germany

19) Multiscale modelling of organic semiconductors: from elementary processes to devices

Location : IMAG building, University Grenoble Alpes (see <https://batiment.imag.fr/en/contact-addresses-access>)

September 12, 2017 - September 15, 2017

- Thierry Deutsch
French Alternative Energies and Atomic Energy Commission (CEA), Grenoble, France
- Denis Andrienko
Max Planck Institute for Polymer Research, Germany
- Xavier Blase
Institut Néel, CNRS, Grenoble, France
- Alison B. Walker
University of Bath, United Kingdom
- **Francesco Mercuri**
CNR-ISMN, Italy
- Peter Bobbert
TU Eindhoven, The Netherlands, The Netherlands
- Wolfgang Wenzel
Karlsruhe Institute of Technology (Germany), Germany

20) ESDW8: Meso- and Multiscale Modelling

Location : CECAM-DE-MMS

September 18, 2017 - September 29, 2017

- Carsten Hartmann
BTU Cottbus-Senftenberg, Germany
- Luigi Delle Site
Institute for Mathematics, FU Berlin, Germany
- Christian Krekeler
Freie Universität Berlin, Germany

21) Disordered protein segments: revisiting the structure-function paradigm

Location : CECAM-FR-MOSER, Institut Henri Poincaré, Paris, France.

October 3, 2017 - October 6, 2017

- Sophie Sacquin-Mora
Laboratoire de Biochimie Théorique, CNRS-UPR9080, France
- Birthe Kragelund
University of Copenhagen, Denmark
- Ben Schuler
University of Zurich, Switzerland
- Elena Papaleo
Danish Cancer Research Center, Denmark
- Chantal Prevost
Laboratoire de Biochimie Theorique LBT - CNRS UPR 9080, France
- Tâp Ha-Duong
BioCIS - Faculté de Pharmacie - Université Paris Sud, France

22) Insights into skin permeation: from theory to practice

Location : CECAM-HQ-EPFL, Lausanne, Switzerland
October 16, 2017 - October 18, 2017

- Chinmay Das
University of Leeds, United Kingdom
- Massimo Noro
Unilever, United Kingdom
- Anna Akinshina
University of Salford, United Kingdom

23) Computational approaches to investigating allostery

Location : CECAM-HQ-EPFL, Lausanne, Switzerland
October 30, 2017 - November 1, 2017

- Emanuele Paci
University of Leeds, United Kingdom
- Shoshana Wodak
VIB, Brussels and University of Toronto, Belgium
- Nikolay Dokholyan
University of North Carolina, Chapel Hill, USA

24) Superconductivity in atomically thin materials and heterostructures

Location : CECAM-Lugano, Lugano, Switzerland
November 20, 2017 - November 23, 2017

- Milorad Milosevic
Universiteit Antwerpen, Belgium
- Dimitri Roditchev
Institut des Nanosciences de Paris, Université Paris, France
- Andrea Perali
University of Camerino, Italy

25) Physics and Chemistry at Fluid/Fluid Interfaces

Location : CECAM-AT
December 11, 2017 - December 13, 2017

- Marcello Sega
University of Vienna, Austria
- Pal Jedlovsky
Eszterházy Károly University, Eger, Hungary, Hungary

Scuole 2017

1) Advanced Workshop on High-Performance & High-Throughput Materials Simulations using QUANTUM ESPRESSO

Location : The Abdus Salam, International Centre for Theoretical Physics (ICTP)
January 16, 2017 - January 28, 2017

- Stefano Baroni
International School for Advanced Studies (SISSA), Trieste, Italy
- Nicola Marzari
Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL), Switzerland
- Paolo Giannozzi
University of Udine, Italy
- Andrea Ferretti
CNR-Institute of Nanoscience, Modena, Italy
- Stefano de Gironcoli
International School for Advanced Studies (SISSA) and CNR-DEMOCRITOS IOM, Trieste, Italy
- Ivan Girotto

International Center for theoretical Physics, Italy

- Matteo Cococcioni
Swiss Federal Institute of Technology Lausanne, Switzerland

2) Basic techniques and tools for development and maintenance of atomic-scale software

Location : CECAM-HQ-EPFL, Lausanne, Switzerland

March 27, 2017 - March 31, 2017

- Francesco Sottile
Ecole Polytechnique, Palaiseau, France
- Micael Oliveira
Max Planck Institute for the Structure and Dynamics of Matter, Hamburg, Germany
- Yann Pouillon
Materials Evolution, Spain
- Damien Caliste
Alternative Energies and Atomic Energy Commission (CEA), France
- Matthieu Verstraete
University of Liege, Belgium

3) Advanced computing of excited state properties in solids and nanostructures with Yambo

Location : CECAM-HQ-EPFL, Lausanne, Switzerland

April 24, 2017 - April 28, 2017

- Myrta Gruning
Queen's University Belfast, United Kingdom
- Conor Hogan
CNR-ISM, Rome and University of Rome Tor Vergata, Italy
- Andrea Marini
CNR-ISM, Italy
- Alejandro Molina-Sánchez
University of Valencia, Spain
- Daniele Varsano
S3, CNR Istituto di Nanoscienze, Italy

4) Hybrid Quantum Mechanics / Molecular Mechanics (QM/MM) Approaches to Biochemistry and Beyond

Location : CECAM-HQ-EPFL, Lausanne, Switzerland

May 15, 2017 - May 19, 2017

- Carme Rovira
University of Barcelona, Spain
- Mauro Boero
University of Strasbourg and CNRS - IPCMS, France
- Ari Paavo Seitsonen
Ecole Normale Supérieure, France
- Ursula Roethlisberger
Swiss Federal Institute of Technology Lausanne (EPFL), Switzerland

5) Summer School on Atomistic Simulation Techniques for Material Science, Nanotechnology, and Biophysics

Location : CECAM-IT-SIDE

June 14, 2017 - June 30, 2017

- Stefano de Gironcoli
International School for Advanced Studies (SISSA) and CNR-DEMOCRITOS IOM, Trieste, Italy
- Andrea Dal Corso
International School for Scientific Studies (SISSA) and CNR-IOM-DEMOCRITOS, Trieste, Italy
- Alessandra Magistrato
CNR-IOM@SISSA, Italy

6) Liquid Crystal Modelling and Simulation: A Comprehensive Introduction

Location : Ettore Majorana Centre, Erice (TP)

July 14, 2017 - July 18, 2017

- Antonio DiCarlo
CECAM-IT-SIMUL Node, Italy
- Claudio Zannoni
Universita' di Bologna, Dipartimento di Chimica Industriale "Toso Montanari", Italy
- Paolo Biscari
Politecnico di Milano, Italy
- Paolo Pasini
INFN - Istituto Nazionale di Fisica Nucleare, Italy

7) Hands-on Tutorial on CFD using Code_Saturne

Location : CECAM-DE-JUELICH

October 4, 2017 - October 6, 2017

- Charles Moulinec
STFC Daresbury Laboratory, United Kingdom
- Juan Uribe
EDF R&D UK Research Centre, United Kingdom
- Stefano Rolfo
STFC Daresbury Laboratory, United Kingdom