

CECAM (Centre Européen de Calcul Atomique et Moléculaire)
Relazione sulle attività - Anno 2019

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 afferenza:

- [CECAM-AT](#)
- [CECAM-FI](#)
- [CECAM-FR-MOSER](#)
- [CECAM-FR-RA](#)
- [CECAM-FR-GSO](#)
- [CECAM-DE-MMIP](#)
- [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 à 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 2019 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 2019 sono state organizzate due conferenze (2), venti scuole (20) e quarantasette workshop (47), di cui 2 hanno visto l'organizzazione da parte di ricercatori e ricercatrici CNR, si veda Appendice A.

Per il 2020 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 2019 all'interno dell'Organismo e indicazioni circa le ricadute sulla comunità scientifica nazionale

Nel 2019 è stato assegnato il premio Berni J. Alder dal CECAM al ricercatore italiano Sauro Succi, dirigente di ricerca al CNR-IAC sino al 2018 ed attualmente Principal Investigator presso il Center for Life Nanoscience dell'Istituto Italiano di Tecnologia. La cerimonia si è tenuta l'11 settembre 2019 a Losanna durante la conferenza per celebrare i primi 50 anni del Centro.

Il **Premio Berni J. Alder CECAM** riconosce contributi eccezionali nel campo della simulazione microscopica della materia. Il premio ha lo scopo di onorare un singolo scienziato; eccezionalmente può essere assegnato al massimo a tre scienziati che abbiano contribuito in ugual misura al tema specifico per il quale il premio è assegnato. Questo è il più prestigioso premio europeo per le simulazioni al computer in fisica / chimica della materia

condensata, fisica statistica e chimica fisica. Il premio da 5.000 euro, assegnato ogni tre anni, è stato originariamente creato nel 1999.

Durante il 2019 come rappresentante CNR ho partecipato al CECAM Council Meeting generale, tenutosi presso la sede di Losanna a Novembre 2019.

Durante il meeting si sono discusse le linee finanziarie per il 2020-2021 e si sono valutate le attività svolte nel 2019. E' stata inoltra messa in atto la variazione allo statuto del CECAM proposta nel 2018, al fine di favorire attività esercitate da ricercatori appartenenti a stati non Europei, che è stato approvato nel corso del 2019.

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)

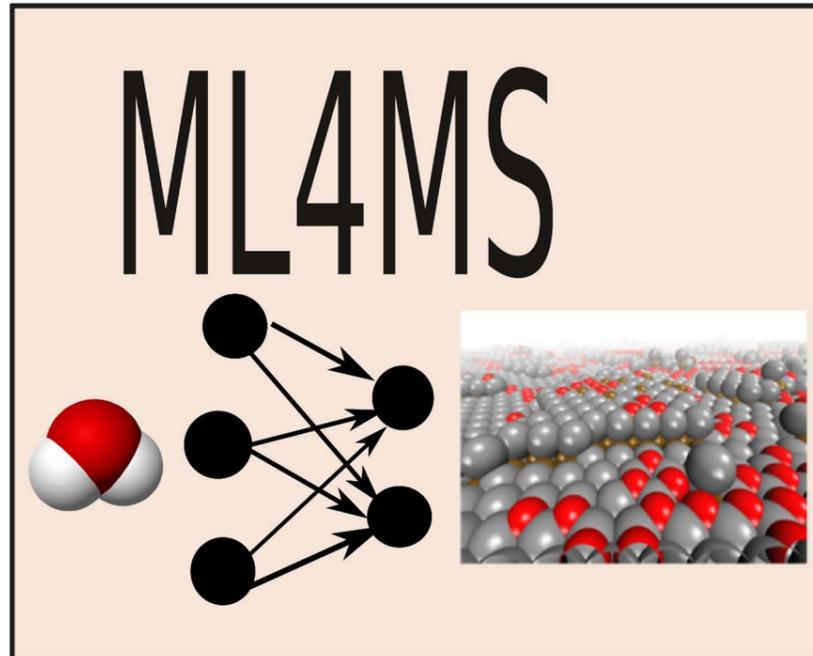
Il vice-direttore del CECAM è la Dr.ssa Sara Bonella, proveniente dall'Università di Roma La Sapienza.

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

Perugia, 15/09/2020





November 12, 2019 – November 15, 2019
PROGRESSES AND CHALLENGES IN MODELING ACTIVATED
PHENOMENA: FROM MACHINE-LEARNED ENERGY SURFACE SAMPLING
TO MULTI-SCALING APPROACHES

Type Flagship Workshop

Location CNRS-LAAS and University of Toulouse Paul Sabatier

Organizer Nicolas Combe (CEMES-CNRS),

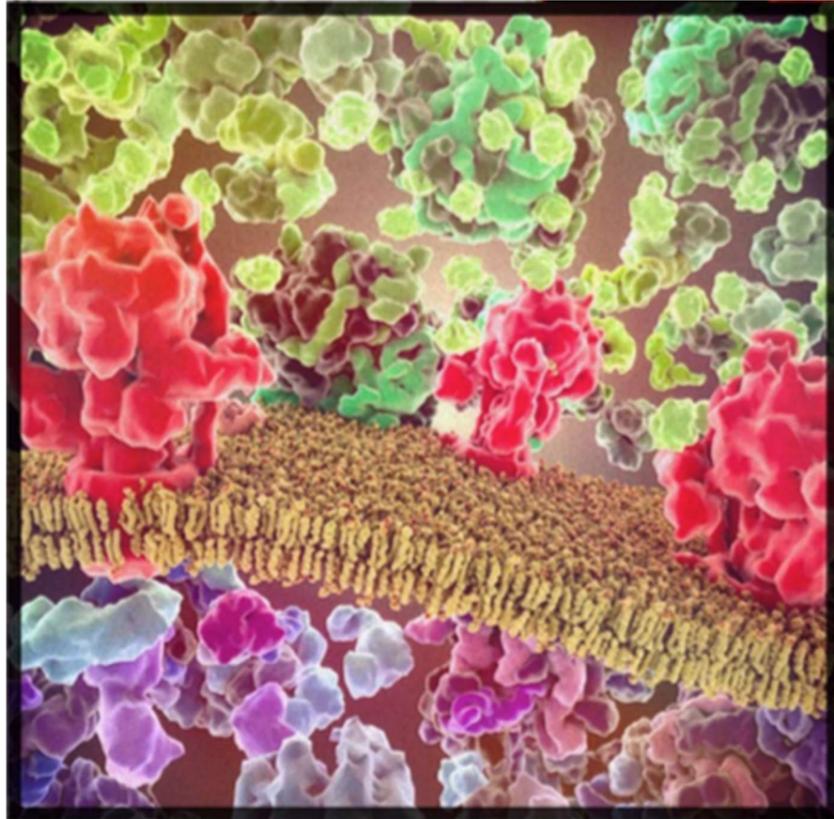
Stefano de Gironcoli (Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati -
International School for Advanced Studies),

Anne HEMERYCK (LAAS-CNRS),

Layla Martin-Samos (CNR-IOM Democritos),

Nicolas Richard (CEA),

Nicolas Salles (CNR-IOM/Democritos National Simulation center)



February 04, 2019 – February 06, 2019

MULTISCALE MODELING FROM MACROMOLECULES TO CELL:
OPPORTUNITIES AND CHALLENGES OF BIOMOLECULAR SIMULATIONS

Type Flagship Workshop

Location CECAM-HQ-EPFL, Lausanne, Switzerland

Organizer Rommie Amaro (University of California at San Diego),

Alexandre Bonvin (Utrecht University),

Matteo Dal Peraro (Swiss Federal Institute of Technology Lausanne (EPFL)),

Giulia Palermo (University of California Riverside),

Valentina Tozzini (Istituto Nanoscienze, CNR)