



L'anno duemiladodici, addì **25 settembre** alle ore 15.30, a seguito di regolare convocazione trasmessa con nota prot. n. 55624 del 20 settembre 2012, nell'Aula Organi Collegiali, si é riunito il Senato Accademico per l'esame e la discussione degli argomenti iscritti al seguente ordine del giorno:

.....o m i s s i s

Sono presenti: il Rettore, prof. Luigi Frati, Presidente, ed i componenti del Senato Accademico: prof. Francesco Avallone, prof. Giorgio Spangher, prof. Giuseppe Ciccarone, prof. Fabrizio Vestroni, prof. Renato Masiani (entra alle ore 16.32), prof. Giuseppe Venanzoni, prof.ssa Luigia Carlucci Aiello, prof. Piero Negrini, prof.ssa Marta Fattori, prof. Vincenzo Ziparo, Eugenio Gaudio, prof. Adriano Redler (entra alle ore 16.40), prof. Vincenzo Nesi, prof.ssa Marina Righetti, prof. Giuseppe Santoro Passarelli (entra alle ore 16.10), prof.ssa Emma Baumgartner, prof. Marcello Scalzo, prof. Francesco Quaglia, prof. Andrea Magri, prof. Davide Antonio Ragozzino, prof. Alfredo Antonaci (entra ore 19.15), prof. Felice Cerreto, prof.ssa Adelina Maria Teresa Borruto, prof. Giorgio Piras, prof. Fabio Giglioni, prof. Enrico Fiori, sig. Beniamino Altezza, sig. Livio Orsini, sig. Pasquale De Lorenzo, sig. Alessandro Delli Poggi, sig. Fabrizio Fioravanti, dott. Giuseppe Rodà, arch. Giovambattista Barberio, dott. Francesco Mellace, dott. Giuseppe Alessio Messano e il Direttore Generale Carlo Musto D'Amore che assume le funzioni di Segretario.

Assistono: prof. Antonello Biagini, prof.ssa Tiziana Catarci, prof. Federico Masini, prof. Giancarlo Ruocco, prof. Bartolomeo Azzaro e prof. Renato Foschi.

Assenti giustificati: prof. Stefano Biagioni, prof. Fabrizio Orlandi e prof. Pierluigi Valenza.

Assenti: prof. Guido Valesini, sig. Vito Trinchieri e dott. Paolo Piccini.

Il Rettore, constatata l'esistenza del numero legale, dichiara l'adunanza validamente costituita ed apre la seduta.

.....o m i s s i s



Senato
Accademico

Seduta del

25 SET. 2012

PROPOSTA DI ISTITUZIONE DEL NODO ITALIANO PER LA SCIENZA COMPUTAZIONALE NELL'AMBITO DEL PROGETTO EUROPEO "CENTRO EUROPEO PER IL CALCOLO ATOMICO E MOLECOLARE" - CECAM PRESSO SAPIENZA

Il Presidente sottopone all'attenzione del Senato Accademico la seguente relazione predisposta dal Settore Convenzioni dell'Ufficio per la Valorizzazione della Ricerca Scientifica e Innovazione.

Per il tramite della Commissione Innovazione è pervenuta la proposta sottoposta dai Dipartimenti di Fisica, Chimica, Ingegneria Meccanica e Aerospaziale, Ingegneria Chimica Materiali Ambiente, Ingegneria Civile Edile e Ambientale e Ingegneria Informatica, Automatica e Gestionale, per l'istituzione, presso la Sapienza, di un nodo per la scienza computazionale nell'ambito del progetto europeo CECAM, quale struttura direttamente riconducibile all'Ateneo per l'attività di calcolo scientifico e tecnico, di cui si riporta in allegato parte integrante l'Agreement costitutivo.

Per evidenziare l'importanza di tale progetto si rammenta che grazie all'uso combinato di appropriati modelli teorici e del computer come strumento di calcolo, le simulazioni consentono di affrontare in maniera predittiva lo studio di sistemi di grande interesse di base ed applicativo, ma troppo complessi per una descrizione analitica e quindi rimasti a lungo ai margini della ricerca.

L'efficacia del metodo è testimoniata dalla diversità delle aree in cui si è affermato come guida teorica: dalla fisica di base alla scienza dei materiali, dalla cosmologia alla biologia, dalla chimica all'ingegneria delle costruzioni civili.

L'impatto delle metodologie computazionali sulla scienza, e sulla ricerca industriale, negli ultimi cinquant'anni è documentato dall'aumento delle pubblicazioni e delle riviste specializzate in questo campo. L'affidabilità del metodo offre inoltre – in campi come la biochimica e la ricerca aerospaziale – la possibilità di notevoli risparmi grazie a uno screening preliminare delle proprietà di materiali complessi che prima potevano essere studiati solo con costosi mezzi sperimentali.

L'interdisciplinarietà delle applicazioni e delle competenze necessarie nel campo della simulazione rendono essenziale un coordinamento dell'attività nel settore a livello nazionale ed europeo. In Europa, a partire dal 1969, questo ruolo di coordinamento è stato svolto dal Centro Europeo per il Calcolo Atomico e Molecolare (CECAM). Il CECAM è oggi un polo d'eccellenza di livello mondiale che promuove e diffonde lo sviluppo dei metodi simulativi ed il cui consiglio scientifico è composto da 40 rappresentanti di enti di ricerca di 9 Paesi UE e della Svizzera.

A partire dal 2008, anno del trasferimento della sede centrale del CECAM da Lione a Losanna, il CECAM si è strutturato in una serie di nodi, ad oggi 14, con sede in Irlanda (1), Francia (2), Germania (4), Spagna (1), Olanda (1), Gran Bretagna (2), Austria (1). L'Italia ospita due nodi CECAM presso la SISSA (Democritos) e la Scuola Normale Superiore a Pisa.

UFFICIO VAL. R.S. e INNOVAZIONE

Settore Convenzioni

Il Responsabile

Dott. Massimo Bartolotta



Senato
Accademico

Seduta del

25 SET. 2012

Dimensione e qualità della comunità computazionale italiana giustificano la creazione di un terzo nodo, collocato in modo da catalizzare l'attività del centro-sud del Paese e fare da raccordo con altre realtà nel Mediterraneo (per esempio Israele, che ha chiesto, attraverso il Weizmann, l'adesione al CECAM). Inoltre, le finalità dei nodi italiani esistenti sono prevalentemente di tipo accademico (organizzazione di scuole e di workshop) mentre sarebbe opportuno dare respiro più ampio all'iniziativa organizzando anche attività di raccordo con realtà produttive quali le piccole e medie imprese del territorio.

Obiettivo di questa proposta è, pertanto, la creazione di un nodo della rete CECAM con sede presso Sapienza che soddisfi le succitate esigenze. Il nodo sarà frutto della collaborazione fra diversi dipartimenti dell'Ateneo e il consorzio interuniversitario per il calcolo scientifico CASPUR. La sua creazione permetterà di sfruttare e promuovere la sinergia già in atto fra realtà riconosciute a livello internazionale (Università romane e CASPUR). Il Consorzio si occuperà del supporto tecnico per i servizi di base ed il computing scientifico (connessione internet, email, web, etc.). Inoltre, qualora l'istituendo nodo CECAM decidesse di dotarsi di macchine di calcolo dedicate, il CASPUR provvederà alla loro installazione e gestione.

Le finalità principali del nodo SAPIENZA saranno:

- creare un punto di riferimento scientifico in grado di catalizzare la ricerca italiana nel campo della simulazioni e attrarre studiosi dell'area mediterranea ed europea;
- operare per la ricerca e per le infrastrutture per la ricerca nei settori afferenti;
- creare opportunità di formazione ad alto livello; favorire collaborazioni scientifiche fra gruppi di scienziati italiani e non.

Inoltre il nodo si proporrà come interlocutore di soggetti pubblici e privati (o di natura mista come i Distretti tecnologici) per svolgere ricerca avanzata e consulenza; fungerà da contenitore per la partecipazione a bandi nazionali e comunitari per i quali l'integrazione di competenze diverse nel campo del calcolo scientifico e tecnico, e dell'high performance *computing* (HPC) possa costituire elemento di forte competitività.

Il Nodo – aperto alla partecipazione di altri partners scientifici ed istituzionali - avrà sede a Roma presso il CASPUR. In caso di approvazione del progetto, il CASPUR, nelle more dell'acquisizione del parere favorevole del CINECA (vedi contratto d'affitto di ramo d'azienda stipulato tra CINECA e CASPUR in data 1/07/2012) metterà a disposizione del Centro:

- i locali per la sede (incluse le sale corsi per le attività didattiche);
- parte delle sue risorse di calcolo;
- una squadra di supporto tecnico (per le risorse di calcolo disponibili e per l'eventuale supporto nello sviluppo e *maintenance* del software)
- una unità part time per l'amministrazione

UFFICIO VAL. R.S. e INNOVAZIONE

Settore Convegni

Il Responsabile

Dott. Massimo

CUW

R



25 SET. 2012

Si riassumono brevemente le attività del Nodo:

Ricerca: l'attività di ricerca del Nodo avrà come oggetto principale lo sviluppo di metodi, algoritmi e programmi per la simulazione e l'applicazione di tali metodi a sistemi fisici, chimici, biologici ed ingegneristici. La ricerca sarà portata avanti utilizzando come strumenti anche Visiting fellows e Postdoctoral fellows.

Sviluppo e manutenzione di software applicativo scientifico: scopo di questa azione è sviluppare e mantenere gli strumenti informatici necessari a rendere utili ed accessibili alla comunità scientifica gli algoritmi ed i modelli frutto dell'attività di ricerca del Centro. Il CASPUR fornirà il supporto per l'implementazione di questi algoritmi e modelli sulle più moderne architetture di calcolo.

Formazione e Workshop:

- Scuole e Tutorials: su temi scientifici (idee e metodi nuovi in campo simulativo, algoritmi, uso di codici scientifici) e tecnici (sviluppo di software, amministrazione di sistema di cluster di calcolo).
- Workshop organizzati su proposta di scienziati italiani e stranieri. I workshop avranno un numero di partecipanti relativamente piccolo, 10-20, saranno concentrati su un tema specifico, che si intende sviluppare/risolvere, e caratterizzati dall'ampio spazio riservato alla discussione. L'esperienza del CECAM mostra come questa formula sia estremamente efficace nel produrre nuovi risultati.

Servizi alle imprese e ai distretti tecnologici

Si creeranno piattaforme di dialogo tra mondo accademico e realtà produttive finalizzate alla discussione e messa in opera di specifici piani di ricerca congiunti. Si distingueranno progetti di due categorie:

- *Progetti di lungo periodo*: caratterizzati da una fase di start up fondata su seminari tecnologici fortemente interdisciplinari e da studi di fattibilità che dovranno portare alla definizione di metodi e software originali con un impatto di lungo termine;
- *Progetti di breve periodo*: caratterizzati dallo sfruttare tecniche di calcolo consolidate e dall'obiettivo di creare protocolli computazionali standard per esperimenti in vitro e/o test di prototipi con ricadute di breve e medio periodo.

La struttura scientifica e amministrativa del nodo sarà composta da:

- *Steering Committee*: il compito di questo organo è definire le politiche scientifiche e tecniche del centro, coordinandole con il Centro di Losanna: definizione del programma di workshop, scuole, tutorial; sviluppo di azioni per la partecipazione a finanziamenti nazionali ed internazionali delle attività scientifiche e tecniche del nodo; selezione dei visiting fellow e dei progetti di ricerca sui quali selezionare ed impegnare

UFFICIO
Settore di
Innovazione
Il Responsabile
Dott. Massimo Bartoletti

uw

8



25 SET. 2012

UFFICIO VICE PRESIDENTE R.S. e INNOVAZIONE
Settore Convenzioni
Il Responsabile
Dott. Massimo Barilanti

i postdoctoral fellow ed i dottorandi; direzioni per lo sviluppo del software scientifico sviluppato dal centro. Dalle competenze dello *Steering Committee* è esclusa l'attività di ricerca del direttore e del suo gruppo. I membri dello *Steering Committee* verranno scelti tra scienziati italiani ed internazionali nelle discipline scientifiche e tecniche (computing) di interesse per il centro. Il Direttore Scientifico sarà membro e portavoce dello *Steering Committee*, rappresentandolo nel Board of Directors dei nodi CECAM a Losanna (come da Agreement del CECAM in allegato parte integrante).

- Direttore Scientifico: il compito del Direttore Scientifico è quello di implementare le linee strategiche definite dallo *Steering Committee*. È onere del Direttore sviluppare tutti gli strumenti necessari per valutare annualmente l'attività di ricerca dei *postdoctoral fellow* e dei dottorandi del centro. Il Direttore dovrà anche verificare che il team di sviluppo software svolga l'attività programmata. Il Direttore, una volta superata la fase di start up, sarà selezionato in base ad una *call* internazionale sul modello di quella utilizzata negli altri Centri CECAM e resterà in carica per quattro anni secondo la modalità che verrà decisa per il CECAM
- Segreteria scientifica: supporta la direzione in tutte le sue attività, sia per quanto riguarda la ricerca che la formazione.
- Supporto tecnico per i servizi di base ed il *computing* scientifico: Il CASPUR offrirà i servizi informatici di base (connessione internet, email, web, etc.). Inoltre, qualora il centro decidesse di dotarsi di macchine di calcolo dedicate, il CASPUR provvederà alla loro installazione e gestione secondo le modalità che verranno concordate tra il centro ed il CASPUR stesso.

Per la piena autonomia ai fini dell'adesione al CECAM (con 1 diritto di voto nel Council e due membri rappresentanti uno scientifico ed uno amministrativo) il budget richiesto è di 30.000 €/anno, scelta che garantisce capacità contrattuale e denota una visibile strategia di Ateneo. Tale importo graverà sul bilancio universitario Sapienza.

Per le attività da svolgere nulla risulta da corrispondere al CECAM, ma il nodo deve garantire un volume di attività minima di un valore commisurabile a 50.000 €/anno. Pertanto per le attività scientifiche espletate dal nodo locale, che dovranno rispettare lo standard qualitativo CECAM, non è previsto alcun flusso di cassa in uscita. Tali attività saranno comunque coordinate dal Direttore locale del nodo in stretta sinergia con la Sede Centrale CECAM presso Losanna.

Il Presidente invita questo Consesso a deliberare in merito alla costituzione di un nodo CECAM presso Sapienza.



SAPIENZA
UNIVERSITÀ DI ROMA

Senato
Accademico

Seduta del

25 SET. 2012

Allegati parte integrante: Agreement per la costituzione del nodo italiano
CECAM presso Sapienza

SEGRETERIA
DIREZIONE
UFFICIO
PROF. PIETRO
MARTINELLI
PIETRO MARTINELLI

Car

sp



25 SET. 2012

DELIBERAZIONE N. 371/12

Il Presidente pone in votazione la proposta di delibera.

IL SENATO ACCADEMICO

- LETTA** la relazione istruttoria predisposta dal Settore Convenzioni dell'Ufficio Valorizzazione Ricerca Scientifica e Innovazione;
- CONSIDERATE** le importanti finalità del progetto di costituzione del nodo CECAM presso l'Ateneo;
- ESAMINATO** il testo dell'Agreement per la costituzione del nodo CECAM presso Sapienza;
- ACQUISITA** la preventiva disponibilità del Consorzio CASPUR a collaborare al progetto in narrativa;
- CONSIDERATO** il progetto di fusione per incorporazione del CASPUR in CINECA e il relativo contratto d'affitto di ramo d'azienda già stipulato in data 1/07/2012;

con voto unanime

DELIBERA

- di approvare la proposta di costituire un nodo CECAM presso Sapienza previa acquisizione del parere favorevole del CINECA;
- di dar mandato al Rettore per la firma dell'Agreement di costituzione del nodo CECAM.

Letto e approvato seduta stante per la sola parte dispositiva.

IL SEGRETARIO
Carlo Musto D'Amore

IL PRESIDENTE
Luigi Frati

The CECAM Node at Sapienza University of Rome

1 Purpose

This agreement between Sapienza University of Rome and CECAM establishes a CECAM node within Sapienza University of Rome. The Agreement forms a supplement to the Convention of CECAM and is subject to the provisions in that Convention. In particular, Articles 1, 4 and 5 of the Convention describe the multi-nodal structure of CECAM and define the roles of the headquarters and nodes within that structure.

Sapienza University of Rome is a Member Organisation of CECAM

2 Duration

This Agreement will apply for the 4 years between *start date* and *end date*.

During the final year of the Agreement, the CECAM Council and Sapienza University of Rome will review it, consider any proposed modifications to its present form and agree either to extend it for a further 4 years or to terminate it.

3 Objectives of CECAM

The general purpose of CECAM is to organize and promote the range of activities listed in Article 1 of the Convention in order to enhance European cooperation in computational research in biology, chemistry, engineering and physics.

4 Objectives of Sapienza University of Rome

The principal in-house computational research interests and capabilities of Sapienza University of Rome are as follows.

[Brief description to be inserted here.]

The interests and capabilities of Sapienza University of Rome with regard to the support of computational research within a wider scientific community are as follows.

[Brief description to be inserted here.]

The infrastructure available at Sapienza University of Rome for CECAM activities is as follows.

[Brief description to be inserted here.]

These interests, capabilities and infrastructure are the basis for the establishment of a CECAM node within Sapienza University of Rome.

5 The Director of Node Sapienza University of Rome

Either:

The Director of Node Sapienza University of Rome (that is, the CECAM node within Sapienza University of Rome) will be [name of Director]. By this Agreement the

Council of CECAM endorses this appointment, having followed the procedure for doing so laid down in paragraph 6.9(ii) of the Convention.

Or:

The Director of Node X (that is, the CECAM node within *Sapienza University of Rome*) will be chosen by the following procedure *[specify the procedure for appointing the Director, the procedure to culminate in endorsement by the Council of CECAM]*.

The duration of the appointment of the Director of Node Sapienza University of Rome shall be a maximum of four years. In the event that the Director of Node Sapienza University of Rome has to be replaced, Sapienza University of Rome will identify a successor by the following procedure *[specify the procedure for appointing the Director, the procedure to culminate in endorsement by the Council of CECAM]*, and the appointment will be subject to the endorsement of the Council of CECAM.

The Director of CECAM together with all the Node Directors will constitute the CECAM Board of Directors. This Board will be chaired by the Director of CECAM and carry out the tasks assigned to it in Article 6.14 of the Convention. Sapienza University of Rome agrees that *[name of Director]* will represent Node Sapienza University of Rome on the Board of Directors.

6 CECAM Activities at Node Sapienza University of Rome

The entire programme of CECAM activities in any given year, that is

- (i) activities to be hosted at the CECAM Headquarters in EPF Lausanne plus
- (ii) activities to be hosted at the node within Sapienza University of Rome plus
- (iii) activities to be hosted at the other nodes

will be agreed during the previous year following discussions in the Board of Directors, as described in articles 6.13 and 6.14 of the Convention.

Subject to such discussions in the Board of Directors, Sapienza University of Rome intends to participate in the following CECAM activities: *[provide a brief description of the proposed activities for Node X]*

7 Financial Arrangements

Sapienza University of Rome confirms that it is prepared to provide funding of at least € X,000 per annum to support such CECAM activities at Node Sapienza University of Rome as are agreed by the Board of Directors according to paragraph 6. This target budget is to be used for planning purposes. The actual Node budget for a given financial year is confirmed in advance in a meeting of the Board of Directors. The minimum Node budget is 50,000 Euros per year (Article 8.2 of the Convention).

This funding will be used and remain in Sapienza University of Rome and will be clearly identified as the CECAM Node Sapienza University of Rome budget. The transactions within this budget line will be administered by the Director of Node

Sapienza University of Rome and will be reported annually to the Director of CECAM who will include the accounts of all nodes in the complete annual Financial Report to be presented to the Council of CECAM as required by paragraphs 6.9(v), 7.3(vi) and 7.6(iii) of the Convention.

8 Renewal or termination of Agreement

This Agreement will terminate on [date] having been in force for four years. At least 3 months before the Council meeting immediately preceding the above termination date of the Node agreement, the Node Institution writes to the President of the Council stating its wish either to continue to host a Node or to cease Node activities. In the former case, the Node Institution may propose amendments to its Node agreement for the consideration of the Council. The Council then discusses this statement at its next meeting and decides on renewal or termination.