BANDO DI CHIAMATA PER LA COSTITUZIONE DI UN NETWORK PER IL CALCOLO SCIENTIFICO E TECNOLOGICO

Premessa e obiettivi generali

La simulazione *in silico* consente, allo stesso tempo, la progettazione razionale di nuovi sistemi con specifiche caratteristiche e l'analisi del ruolo dei diversi processi chimico-fisici elementari nel determinarne le varie proprietà. Nell'ultimo decennio si sono riscontrati numerosi ed importanti sviluppi nella simulazione di sistemi e processi complessi di interesse biologico, tecnologico ed ambientale. Tuttavia lo sviluppo di una strategia computazionale veramente efficace è spesso ostacolato dalla mancanza di integrazione e scambio di informazioni specifiche, quali codici computazionali, protocolli di simulazione o parametri numerici ottenuti a livello molecolare e necessari per condurre simulazioni mesoscopiche e macroscopiche.
Il Consorzio Interuniversitario Nazionale per La Scienza e Tecnologia dei Materiali (INSTM) intende sviluppare uno strumento di coordinamento interno nel settore del calcolo scientifico e tecnologico (CST). L'area CST del Consorzio comprende numerosi ricercatori attivi a vari livelli e secondo varie modalità organizzative (che vanno dal singolo ricercatore, al gruppo di ricerca, ai network di gruppi di ricerca).
Sono in particolare da sottolineare i seguenti punti:

- Affinchè la ricerca computazionale possa essere proficuamente sviluppata per la scienza e l'ingegneria dei materiali si richiede la disponibilità di almeno tre elementi fondamentali: 1) risorse computazionali ingenti; 2) un know-how scientifico e tecnologico ampio, approfondito e multidisciplinare; 3) un collegamento stretto con le realtà produttive
- All'interno del Consorzio devono essere incoraggiate grandi progettualità condivise, di interesse comune a una comunità di ricercatori più ampia di un singolo gruppo di ricerca (od anche di collaborazioni bilaterali) e ciò implica una adeguata interazione tra le attività di ricerca teoriche e computazionali e quelle strettamente sperimentali ed applicative del Consorzio
- Le numerose attività di ricerca nel settore *modelling* presenti nel Consorzio possono essere condivise in progetti di ampio respiro, che coinvolgano diversi gruppi di ricerca del Consorzio, rivolti sia all'ambito UE che nazionale/regionale, e che permettano di intercettare nuove risorse economiche
- L'impegno del Consorzio con i grandi centri di calcolo nazionali e i circuiti internazionali del settore CST può essere ulteriormente potenziato con un notevole ritorno per il Consorzio stesso sia in termini di risorse che di immagine

Per l'attuazione di questi obiettivi generali il Consorzio si rivolge con una Open Call a tutti i suoi afferenti per costituire un Network dedicato alla ricerca CST (Network INSTM-CST). Il Network:

1. assumerà il ruolo di attore di riferimento in tutte le attività del Consorzio dedicate al calcolo ed agli approcci modellistici.
2. costituirà la dorsale del Consorzio per la creazione e la gestione di una griglia computazionale ad alte prestazioni distribuita sul territorio nazionale e dedicata al calcolo per la scienza dei materiali, mediante la condivisione di competenze e risorse computazionali.
3. fornirà agli afferenti del Consorzio un supporto fattivo *i)* in termini di collaborazione scientifica progettuale per il modelling mirato nelle varie scale spaziali e temporali (sistemi molecolari, supramolecolari, materiali e dispositivi); *ii)* con attività di consulting relativa al CTS ed infine *iii)* in presenza di opportuni accordi ad hoc, di tempo calcolo dedicato sulla griglia computazionale.

Bando di chiamata per la costituzione del Network INSTM-CST

Date queste premesse, INSTM bandisce una chiamata per la costituzione del Network INSTM-CST, per il coordinamento delle attività di calcolo e modellazione dedicate alla scienza e tecnologia dei materiali.

1. Compiti ed obiettivi specifici

Il particolare il Network avrà il compito di

1. Curare i rapporti scientifici e favorire l'interazione di INSTM con le agenzie, organizzazioni, enti nazionali ed internazionali relativamente a progetti specifici dedicati al supercalcolo ed alla modellazione (es. ESFRI- PRACE).
2. Curare i rapporti specifici con i centri di calcolo nazionali (CINECA, CASPUR) e le convenzioni con questi stipulabili.
3. Definire, in accordo con le Sezioni Tematiche coinvolte in progetti regionali, nazionali od europei, le migliori modalità di partecipazione di unità dedicate alla modellazione, indicando tra gli afferenti le competenze più adatte ai progetti in questione.
4. Promuovere la costituzione di un laboratorio INSTM di modellazione chimica ed ingegneristica autonomo, in grado di confrontarsi con circuiti analoghi sviluppati in ambito fisico (INFM, INFN).

5. Promuovere la costituzione di una rete di calcolo distribuito INSTM, che partecipi a pieno titolo ad iniziative internazionali e supporti le richieste computazionali del Consorzio.
6. Fornire attività di consulenza ai gruppi di ricerca del Consorzio che ne facciano richiesta, mediante la creazione di un helpdesk ed anche estendendo risorse computazionali comuni, sotto forma di risorse grid computing (punto 5.) appositamente organizzate per le attività del Consorzio.
7. Partecipare alla definizione delle politiche scientifiche di sviluppo del Consorzio nell'ambito delle attività del Consiglio Scientifico INSTM.

2. Proponenti e struttura interna

Il gruppo dei proponenti è costituito da ricercatori INSTM e da eventuali operatori di enti esterni pubblici o privati, di qualsiasi nazionalità e ragione sociale. L'insieme dei proponenti appartenenti ad una stessa Unità INSTM o ad uno stesso Ente esterno costituisce un Nodo del network. I Nodi sono definiti **Nodi Primari** se appartengono all'INSTM, mentre sono definiti **Nodi Associati** se fanno parte di un Ente esterno. I Nodi Primari sono raggruppamenti di ricercatori con significative risorse computazionali, certificata esperienza scientifica nel campo della ricerca teorica-computazionale e verificate capacità di supporto di attività di grid computing. I requisiti richiesti e le modalità di verifica dei requisiti richiesti ai Nodi Primari sono definiti nell'Allegato 1.
I Nodi Associati contribuiscono al progetto esclusivamente attraverso proprie risorse. La partecipazione di un Nodo Associato dovrà essere certificata, con indicazione delle risorse e delle attività di pertinenza, da una dichiarazione dallo stesso sottoscritta. I requisiti richiesti e le modalità di verifica dei requisiti richiesti ai Nodi Associati sono definiti nell'Allegato 1.
Tra i proponenti afferenti a pieno titolo all'INSTM deve essere individuato un Coordinatore di Network (network coordinator, NC). Per ogni Nodo coinvolto deve essere inoltre individuato un Coordinatore Locale o Local Coordinator (LC). I LC dei Nodi Primari devono essere afferenti a pieno titolo al Consorzio. Il NC è automaticamente LC del Nodo Primario a cui appartiene. NC e LC costituiscono lo staff direttivo del progetto.
Il NC sarà responsabile delle attività del Network. In particolare, dovrà seguire le attività svolte presso i vari gruppi ed organizzare, coadiuvato dai LC, periodiche riunioni di coordinamento tra i partner. I LC hanno l'incarico di dirigere le attività dei vari Nodi tenendo aggiornato il NC, partecipare alle riunioni di coordinamento, fornire al NC le indicazioni necessarie per la stesura delle relazioni sull'andamento delle attività.

3. Entità di partecipazione e numero di sedi coinvolte

Saranno considerate solo quelle proposte che comprendano da **due a cinque Nodi Primari** ed almeno **due Nodi Associati**, definiti secondo i criteri descritti nell'Allegato 1.

4. Durata temporale e monitoraggio

Il Network INSTM-CST svolgerà la sua attività a partire dall'accettazione formale della proposta in un arco temporale temporale basato su cicli di quattro anni, con la presentazione periodica di relazioni di attività scientifiche e finanziarie alla Giunta ed al Consiglio Scientifico INSTM. Alla fine di ogni quadriennio le attività del Network saranno analizzate in dettaglio dalla Giunta INSTM, sentito il Consiglio Scientifico, e previa verifica, potranno essere rinnovate per il quadriennio successivo.

5. Risorse dedicate

Il Consorzio, in un quadro di riorganizzazione complessiva delle risorse attualmente dedicate al CTS, si impegna a fornire al Network assistenza amministrativa, supporto logistico e personale di ricerca (sotto forme da concordarsi: e.g. almeno una annualità post dottorato per ogni anno solare).

6. Modalità di presentazione e selezione

La redazione della proposta - in lingua italiana - dovrà pervenire secondo un modello interno appositamente predisposto e rinvenibile con le istruzioni di compilazione presso il sito http://www.instm.it . La stesura del progetto dovrà completarsi inderogabilmente entro il 7 giugno 2010 alle ore 12:00. Copia cartacea del progetto dovrà pervenire alla Segreteria INSTM – Via Giusti n. 9 – 50121 Firenze inderogabilmente entro il 14 giugno 2010 (valida data di ricezione e non del timbro postale) e indicando sulla busta il riferimento "Network INSTM-CST".
La selezione delle proposte avverrà attraverso una valutazione - secondo criteri descritti nell'Allegato 2 - che verrà effettuata dai componenti della Giunta INSTM, sentito il Consiglio Scientifico, i quali potranno eventualmente avvalersi di esperti del settore per pareri consultivi. La Giunta potrà richiedere integrazioni e/o chiarimenti al NC proponente che si impegna a rispondere entro un mese dalla richiesta inviata dal Consorzio tramite e-mail. In assenza di risposta la proposta sarà dichiarata decaduta. Al termine della valutazione, sarà stilata una graduatoria di merito che sarà resa pubblica con

una presentazione e discussione aperta alla partecipazione degli interessati (NC+LC), prima dell'approvazione ufficiale e dell'avvio del Network.

Allegato 1 - Requisiti di partecipazione

I Nodi Primari dovranno dimostrare esperienze significative in almeno **tre** delle seguenti aree: applicazioni innovative di modelling computazionale, *grid computing* dedicato al calcolo scientifico; sviluppo di nuove metodologie teoriche interpretative per il calcolo scientifico; sviluppo di nuovi codici avanzati per il calcolo scientifico. Inoltre:

1. I Nodi Primari dovranno essere sedi di documentate attività nello sviluppo e nell'applicazione di approcci teorici e computazionali, compresi tra
   - Metodi e modelli quanto-meccanici basati sulla Teoria del Funzionale della Densità (DFT).
   - Metodi e modelli integrati quantistici, atomistici, continui.
   - Simulazioni dinamiche classiche e quantistiche.
   - Metodi di dinamica semiclassica e quantistica per lo studio di reazioni fotochimiche.
   - Metodi multiconfigurazionali per lo studio di stati eccitati ed il calcolo di proprietà di trasporto di carica.
   - Metodi multi-scala per il calcolo di parametri spettroscopici.
   - Simulazioni di dinamica molecolare per la determinazione di parametri strutturali e termodinamici.
   - Approcci di modellizzazione stocastici e deterministici per lo studio delle proprietà cinetiche di sistemi multifase.
   - Simulazioni "coarse grained" per l'interpretazione di proprietà dei materiali su scala nanometrica e micrometrica.
   - Approcci avanzati ad elementi finiti ed a volumi finiti per la soluzione di equazioni idrodinamiche o per problematiche di meccanica del continuo.
   - Metodi e modelli analitici e numerici per lo studio dell'evoluzione di sistemi complessi.
2. I Nodi Primari dovranno esser composti da almeno cinque ricercatori equivalenti INSTM e dovranno fornire
   - un elenco di trenta pubblicazioni, di chiara tematica computazionale e teorica, con almeno un autore tra i componenti strutturati del nodo nell'arco degli ultimi tre anni;
   - una relazione comprovante attività avanzate di sviluppo teorico, *grid computing* e/o implementazione di nuovi codici, applicazioni innovative;
   - Una relazione tecnica comprovante la presenza di significative risorse computazionali locali.

I Nodi Associati dovranno dimostrare esperienze significative in almeno **due** delle seguenti aree: applicazioni innovative di modelling computazionale, *grid computing* dedicato al calcolo scientifico; sviluppo di nuove metodologie teoriche interpretative per il calcolo scientifico; sviluppo di nuovi codici avanzati per il calcolo scientifico. Inoltre dovranno fornire

- un elenco di quindici pubblicazioni, di chiara tematica computazionale e teorica, con almeno un autore tra i componenti strutturati del nodo nell'arco degli ultimi tre anni;
- una relazione comprovante attività avanzate di sviluppo teorico, *grid computing* e/o implementazione di nuovi codici, applicazioni innovative.

Allegato 2 - Elementi validi per la selezione

Costituiranno elementi qualificanti per la selezione delle proposte di Network:

1. Il numero e le qualifiche dei Nodi Primari; poiché in prospettiva il Network INSTM-CST costituirà la principale struttura operativa del Consorzio nel settore del modelling, sarà considerato elemento altamente qualificante la presenza di un **ampio spettro di competenze del Network nella sua totalità.**
2. Una chiara struttura interna di *governance* e divisione delle competenze; una chiara definizione di compiti e competenze dei vari Nodi sarà valutata positivamente: in particolare saranno preferite quelle proposte in cui a carico dei Nodi Primari siano individuati know-how specifici, che consentano loro un ruolo di leadership nei vari settori specifici (modelling per la biomedicina, materiali per l'avionica, soft matter, sviluppo di metodologie, grid computing etc.).
3. La presenza di risorse computazionali già esistenti ed un chiaro progetto di condivisione delle stesse con il Consorzio; saranno valutati con particolare interesse quei progetti che intendano sviluppare all'interno del Consorzio strumenti di calcolo distribuito e di diffusione delle competenze.